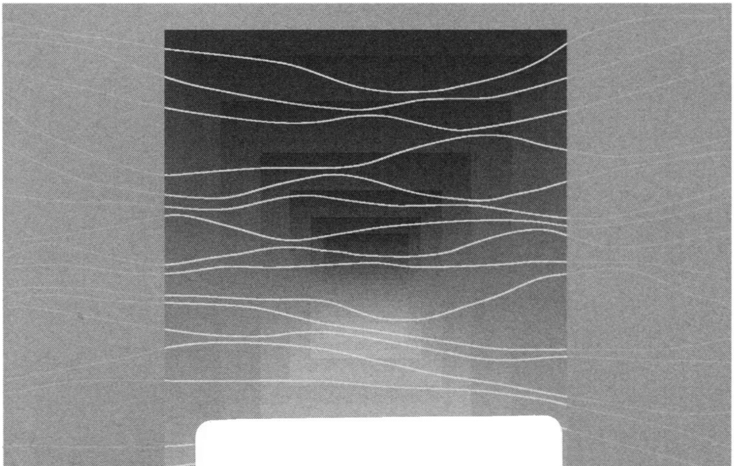
量子物理学のための線形代数

ベクトルから量子情報へ

中原 幹夫 著



培風館

本書の無断複写は，著作権法上での例外を除き，禁じられています。
本書を複写される場合は，その都度当社の許諾を得てください。

はじめに

世の中に「線形代数」と名のつく本は，日本語の本だけでも数え切れないほどある．実際，数学教室には毎年 10 冊前後の新刊書の献本があるくらいである．膨大な数の線形代数の本があるにもかかわらず本書を著したのは，これらの本のほとんどが数学者によって書かれており，そのめざすところが物理の学生の需要と必ずしも一致しないからである．

さらに，物理の学生が 2 年次または 3 年次で学ぶ量子力学には，ブラとケットという 2 種類の「ベクトル」が現れる．これはベクトルを座標系，すなわち成分によらない形で扱うには最適の記法である．ブラ・ベクトルは，ケット・ベクトルの双対ベクトルであり，自然に双対空間が導入されている．せっかくブラやケットを学ぶのに，線形代数でこれらを使わないのはもったいない．また，量子力学で頻繁にでてくる射影演算子，完全性関係やスペクトル分解は，線形代数を学ぶうえで大変便利な道具であるが，これらも 1, 2 年次の線形代数のテキストで扱われることは稀である．

本書では，これらの点を考慮し，将来，量子力学を学ぶであろう学生，現在学んでいる学生，またはすでに学んだ学生が，線形代数と量子力学をストレートに結び付けられることを念頭においている．本書は決して線形代数の入門書ではない．学部 2, 3 年生を対象にしており，行列，行列式，ベクトル空間の初歩については既知とする．これらについても復習と記号の導入のためにある程度のページを割くが，本書を線形代数の一入門書として用いることがないよう注意されたい．場合によっては用語が定義されるまえに，その用語を使うことがあるが，それもすでに基礎を勉強された読者の便宜を図ってのことである．後半の量子力学への応用は，量子力学をまだ学んでいない読者にも理解できるよう，量子力学の入門からはじめた．紙面を節約するために，通常のテキストにみられるような歴史的背景や物理的な動機づけなどは一切扱わず，公理系からはじめた．これはすでに量子力学を学んだ読者にも，いままで学んだことを抽象化するうえで役に立つと期待している．

本書を著すにあたって参考にした本とコメントをあげる．筆者が学生時代に使用したテキストの多くはすでに絶版になっているが，図書館などで手にする機会もあると思いリストに加えた．

- Leslie Hogben, “Handbook of Linear Algebra, Second Edition”, Taylor & Francis, 2014.
  いわば線形代数の百科事典である．第 2 版には量子情報や量子誤り訂正符号の章もある．
- Mikio Nakahara and Tetsuo Ohmi, “Quantum Computing; From Linear Algebra to Physical Realizations”, Taylor & Francis, 2008.
  量子コンピュータのために書かれた本であるが，副題にもあるように，その基礎の線形代数にもかなりのページが割いてある．本書のいくつかの章は，この本と共通する部分が多い．本書を学んだ後，量子コンピュータについてさらに勉強されたい読者はこの本を読まれることをお勧めする．
- Peter Lax, “Linear Algebra”, John Wiley & Sons, 2007.
  Peter Lax はソリトンの研究などで有名な数学者である．この本には線形代数の幅広い応用が紹介されている．読んでいると「こんなところまで応用があるのか！」とびっくりすることが多々ある．本書でもそのいくつかを紹介した．
- 永田雅宣・秋月康夫「代数学と幾何学」共立出版, 1966.
  筆者が大学 1 年のときに，線形代数の講義で使用されたテキストである．初学者にはとても難しい本で，その当時はこんなものが何の役に立つのかさっぱりわからなかった．この本の偉大さが認識できたのは大学院の入って本格的に理論物理を勉強しはじめてからである．いまでもときどきこの本を広げることがある．
- 堀 淳一「物理数学演習」共立出版, 1973.
  この本は線形代数にブラとケットを用いている数少ない本である．私は大学院入試のときにこの本を勉強した．お勧めの本であるが，絶版となっている．

なお，いちいち断らないが，これらの本からは多くのテーマを引用させていただいた．

日ごろ議論の相手をしていただいている，青木貴史，石橋明浩，泉 脩藏，市川 翼，谷村省吾，藤井一幸，松井 優，李 志光の皆さんに感謝する．松井 優さんと山下登茂紀さんには数学者の立場から，鹿野 豊さんには物理学者の立場から，中原理沙さんには本書が対象としている学生の立場から貴重なご意見をいただいた．もちろん本書に関して最終的な責任は著者にある．原稿のミスをチェックし，章末の解答を用意してくれた松井 優さんと坂東将光さんに感謝する．

培風館編集部の岩田誠司氏は，十数年にわたって何度も締め切りをすっぽかす筆者を叱咤激励していただき，本書の完成までこぎつけることができた．ここに感謝したい．最終稿の仕上げでも，大変細かくチェックをしていただいたことを感謝する．また，日ごろは講義や業務に追われており，本書のかなりの部分は出張途中の新幹線の中や空港で飛行機の待ち時間，出張先の宿泊施設で書かれた．これらの施設にも感謝したい．

この本を書くために，長年にわたって週末を犠牲にすることを許してくれた家族への感謝はいうまでもない．

2016 年 5 月

奈良にて

中 原 幹 夫

目　　次

第 I 部　　線 形 代 数

6. 固有値と固有ベクトル　*73*

7. 正 規 行 列　*97*

第 I 部

線 形 代 数

1. ベクトル空間

まず，本書で用いる数の記号を説明する．自然数全体の集合 $\{1, 2, 3, \ldots\}$ を $\mathbb{N}$ で，整数全体の集合 $\{\ldots, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots\}$ を $\mathbb{Z}$ で表す．互いに素な整数 p, q $(q \neq 0)$ を用いて p/q と表される数を有理数といい，その全体の集合を $\mathbb{Q}$ で表す．また，実数全体の集合を $\mathbb{R}$ で，複素数全体の集合を $\mathbb{C}$ で表す．このとき，包含関係

$$\mathbb{N} \subset \mathbb{Z} \subset \mathbb{Q} \subset \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$$

が成り立つ．$\mathbb{N}, \mathbb{Z}, \mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$ は積に関して閉じているが，有理数でない実数である無理数全体の集合は積に関して閉じていない．$\mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$ のように，0 以外の数の商に関しても閉じている集合を体[1)]といい，ベクトル空間の係数に現れる．

物理学では，古典力学や電磁気学は実ベクトル空間で，量子力学は複素ベクトル空間で定式化されるので，本書では，ベクトル空間の係数となる体は実数体 $\mathbb{R}$ と複素数体 $\mathbb{C}$ のみを扱う．どちらか言及しない場合は K を用いる．

その他の記号として，A を B で定義することを

$$A := B$$

で表す．例えば，$\cosh x := (e^x + e^{-x})/2$ は，$(e^x + e^{-x})/2$ で $\cosh x$ を定義するということである．また，証明の終わりを ▮ で，例題の終わりを □ で表す．

---

1)　「体」は「たい」と読む．要は，加減乗除の四則演算が定義されている数の集合である．

1-1　ベクトル空間

高等学校で学ぶベクトル (矢印) には和と実数倍が定義されていたが，行列や関数など，矢印でなくても和や実数倍が計算できる対象は数学や物理学には数多く存在し基本的である．このような演算に注目してその本質的な構造をとらえるために，抽象的なベクトル空間 (または線形空間) を導入する．

集合 V が K 上のベクトル空間であるとは，V の元 (ベクトル) $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ と K の元 (スカラー) $a \in K$ に対して，公理[2] 1.1 を満たす和 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ (重ね合わせともいう) とスカラー倍 $a\boldsymbol{u}$ が定義されている集合である．

公理 1.1　ベクトル空間 V は次の条件を満たす集合である．

任意の $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V$ に対して，和 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v} \in V$ が定義されていて，次を満たす：

(1-1) (和の結合則)　$(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w} = \boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})$　$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w} \in V)$

(1-2) (和の交換則)　$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}+\boldsymbol{u}$　$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V)$

(1-3) (ゼロ・ベクトルの存在)　V の特別な元 $\boldsymbol{0}$ が存在して，$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{0} = \boldsymbol{u}$ $(\boldsymbol{u} \in V)$ を満たす．$\boldsymbol{0}$ をゼロ・ベクトルという．

(1-4) (逆ベクトルの存在)　任意の $\boldsymbol{u} \in V$ に対して，$\boldsymbol{v} \in V$ が存在して，$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ を満たす．この元 $\boldsymbol{v}$ を $\boldsymbol{u}$ の逆ベクトルといい，$-\boldsymbol{u}$ で表す．

任意の $\boldsymbol{u} \in V$ と任意の $a \in K$ に対して，スカラー倍 $a\boldsymbol{u} \in V$ が定義されていて，次を満たす：

(2-1) (スカラー倍の分配則)　$a(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}) = a\boldsymbol{u}+a\boldsymbol{v}$　$(a \in K,\ \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V)$

(2-2) (スカラー倍の分配則)　$(a+b)\boldsymbol{u} = a\boldsymbol{u}+b\boldsymbol{u}$　$(a, b \in K,\ \boldsymbol{u} \in V)$

(2-3) (スカラー倍の結合則)　$(ab)\boldsymbol{u} = a(b\boldsymbol{u})$　$(a, b \in K,\ \boldsymbol{u} \in V)$

(2-4) (スカラー倍の単位元)　$1\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}$　$(\boldsymbol{u} \in V)$

ただし，1 は K の積に関する単位元である．

(1-1) より，3 つのベクトルの和は，単に $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}$ と書いても差し支えない．

---

2)　公理はいままで読者が無意識に使ってきたものであり，まだるっこしいと思われる読者は無視して次に進んでかまわない．

ベクトル空間の構造を調べるとき，ベクトル空間の中に同じ構造をもつ集合があることが重要になる．

定義 1.1 V をベクトル空間とする．V の空でない部分集合 W が V の演算のもとでベクトル空間となるとき，W を V の部分空間という．

V は V の最大の部分空間であり，$\{\mathbf{0}\}$ は V の最小の部分空間である．W が部分空間であることを示すには，定義によれば，公理 1.1 を確認しなければならないが，実際には次が知られている．

命題 1.1 V をベクトル空間とする．V の部分集合 W が次の条件

(0) V のゼロ・ベクトル $\mathbf{0}$ は W に含まれる，

(1) W の任意の元 $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in W$ に対して，$\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v} \in W$ が成り立つ，

(2) W の任意の元 $\boldsymbol{u}$ と任意の $a \in K$ に対して，$a\boldsymbol{u} \in W$ が成り立つ，

を満たすならば，W は V の部分空間である．

問 1.1 V_1, V_2 がベクトル空間 V の部分空間であるとき，$V_1 \cap V_2$ も V の部分空間であることを示せ．

V の任意の部分集合 S (必ずしも部分空間とは限らない) に対して，S を含む最小の部分空間を S が張る部分空間といい，$\mathrm{Span}(S)$ で表す．

1-2 ケット

1-1 節のベクトルやベクトル空間は，公理のみに基づく抽象的なものであった．これからはベクトルに具体的な目鼻立ちを与えることが重要になる．そこで，n 個の K の元を縦に並べたものを具体化したベクトルとして採用し，$|x\rangle$ という記法を用いる．2 つのベクトル

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad |y\rangle = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

に対して，ベクトルの和とスカラー倍を

$$|x\rangle + |y\rangle := \begin{pmatrix} x_1 + y_1 \\ x_2 + y_2 \\ \vdots \\ x_n + y_n \end{pmatrix}, \quad a|x\rangle := \begin{pmatrix} ax_1 \\ ax_2 \\ \vdots \\ ax_n \end{pmatrix} \quad (a \in K)$$

で定義する[3)]と，その全体の集合は公理 1.1 を満たしベクトル空間となるので，これを $V(n;K)$ または K^n で表す．自然数 n を $V(n;K)$ の次元といい，x_j を $|x\rangle$ の j 成分という．

$|x\rangle \in V(n;K)$ を歴史的な経緯からケット，またはケット・ベクトルとよぶ．後に K の元を横に並べたベクトル $\langle x|$ を導入するが，これはブラ，またはブラ・ベクトルとよばれる．ブラとケットをあわせてブラケット (bracket $= \langle \quad | \quad \rangle$) となる[4)]．なお，紙数を節約するために，$|x\rangle = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t$ と表すことがある．^{t} は転置記号である (2-1-2 項参照)．例えば，ゼロ・ベクトルは $\mathbf{0} = (0, 0, \ldots, 0)^t$ と表される．

1-3 線形独立と線形従属

例えば，$\mathbb{C}^2$ において $|u_1\rangle = (1,2)^t$, $|u_2\rangle = (2,4)^t$, $|u_3\rangle = (i,0)^t$ を考える．$|u_1\rangle$ と $|u_2\rangle$ の間には関係式 $|u_2\rangle = 2|u_1\rangle$ が成り立つので，$\mathbb{C}^2$ の元 $|x\rangle = (1,6)^t$ を $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$ の和やスカラー倍で表そうとするとき，

$$|x\rangle = |u_1\rangle + |u_2\rangle + 2i|u_3\rangle = 3|u_1\rangle + 2i|u_3\rangle$$

となり，$|u_2\rangle$ は実際には不要なベクトルであることがわかる．また，$|u_1\rangle$ と $|u_3\rangle$ の間には (自明でない) 関係式は存在しないので，この式はこれ以上簡単にすることはできない．実際，$|u_1\rangle$ と $|u_3\rangle$ の間に関係式 $c_1|u_1\rangle + c_3|u_3\rangle = \mathbf{0}$ が存在したと仮定する．このとき，第 2 成分をみると $2c_1 = 0$ であり，第 1 成分をみると $ic_3 = c_1 = 0$ なので，自明な関係式 $0|u_1\rangle + 0|u_3\rangle = \mathbf{0}$ のみが成り立つことがわかる．本節ではこの例を一般化し，ベクトルの間の自明でない関係式や，とり出したベクトルの組の無駄のなさについて考える．

3) $a|x\rangle + b|y\rangle = |ax + by\rangle$ という記法を用いることがある．
4) これはこの記法を導入した物理学者ディラックのウィット (ユーモア) である．

K^n の k 個のベクトル $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$, ..., $|u_k\rangle$ をそれぞれスカラー c_1, c_2, ..., $c_k \in K$ 倍し，和をとったもの

$$\sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle + \cdots + c_k|u_k\rangle$$

を $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$, ..., $|u_k\rangle$ の線形結合という．

K^n の k 個のベクトルの組 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ に対して，方程式

$$\sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle = \mathbf{0} \tag{1.1}$$

を考える．k は n と等しくても，n より大きくても，小さくてもよい．(1.1) を各成分ごとにみれば，k 個の変数 $c_1, \ldots, c_k$ に対する n 個の連立 1 次方程式である．もし (1.1) の解が，$c_1 = \cdots = c_k = 0$ のみであるとき，ベクトルの組 $\{|u_1\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ は線形独立であるという．これは，ベクトルの間には自明な関係式しか存在しないことを意味する．線形独立でないとき，すなわち少なくとも 1 つの c_j が 0 でないとき，これらのベクトルは線形従属であるという．これは，ベクトルの間に自明でない線形関係式が存在することを意味する．

定義から，$\mathbf{0}$ を含むベクトルの組は必ず線形従属であり，$\mathbf{0}$ でないベクトル $|u\rangle$ 1 つは線形独立である．また，K^n において k 個の線形独立なベクトルの組 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ が張る部分空間を考えるとき，$|z\rangle = \sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle$ とおくと，$(k+1)$ 個のベクトルの組 $\{|z\rangle, |u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ は線形従属である．

問 1.2 次のベクトルの組は線形独立か線形従属か判断せよ．
(1) $\mathbb{C}^2$ において，$(1, -i)^t$, $(-i, 1)^t$
(2) $\mathbb{C}^3$ において，$(1, -1, 0)^t$, $(1, 0, -i)^t$, $(0, -1, i)^t$

例題 1.1 $\mathbb{C}^2$ において $|u_1\rangle = (1, x)^t$ と $|u_2\rangle = (x, i)^t$ が線形従属となる $x \in \mathbb{C}$ を求めよ．

解答： 方程式 $c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle = \mathbf{0}$ を行列表示すると

$$\begin{pmatrix} 1 & x \\ x & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \mathbf{0}$$

となる．この式が $(c_1, c_2)^t = (0,0)^t$ 以外の解をもつための必要十分条件は，係数行列の行列式が 0 となることである (定理 2.3 参照)：

$$\det \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & i \end{pmatrix} = i - x^2 = 0.$$

したがって，$x = e^{i(\pi/4)}$，$e^{i(5\pi/4)}$ の 2 つの解が得られた． □

問 1.3 $\mathbb{R}^2$ において，2 つのベクトル $|u_1\rangle = (x, y)^t$，$|u_2\rangle = (-y, x-2y)^t$ が線形独立となる $x, y \in \mathbb{R}$ についての条件を求めよ．

1-4 基　底

任意の $|x\rangle \in K^n = V(n; K)$ は

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots + x_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

と表される．ここで

$$|e_1^0\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2^0\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \ldots, \quad |e_n^0\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

とおくと，これらは線形独立であり，(1.2) は $|x\rangle = \sum_{j=1}^{n} x_j |e_j^0\rangle$ となる．したがって，$\{|e_1^0\rangle, |e_2^0\rangle, \ldots, |e_n^0\rangle\}$ はベクトル空間 K^n の骨格をなす無駄のないベクトルの組であるといえる．この $\{|e_1^0\rangle, |e_2^0\rangle, \ldots, |e_n^0\rangle\}$ を K^n の標準基底という．ベクトル空間 K^n の骨格をなす無駄のないベクトルの組は標準基底だけとは限らない．より一般に，これを定義しよう．

定義 1.2 W を K^n の部分空間とする．W の k 個のベクトルの組 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ が線形独立であり $W = \mathrm{Span}(\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\})$ を満たすとき，これらのベクトルの組を W の基底といい，それぞれのベクトルを基底ベクトルという．また，k を W の次元といい，$\dim_K W$，または

単に $\dim W$ で表す．

定理 1.1　W の基底の一つを $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ とする．このとき，W の任意の元 $|x\rangle$ は基底ベクトルの線形結合 $|x\rangle = \sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle$ で一意的に表される．

W の元を基底ベクトルの線形結合で表すことを展開するといい，係数 $c_j \in K$ を $|x\rangle$ の基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ に関する j 成分という．成分をとおして W を眺めてみると，すなわち $|x\rangle$ に $(c_1, c_2, \ldots, c_k)^t$ を対応させると，k 次元部分空間 W は K^k とベクトル空間として区別できない．

定理 1.1 の証明：$|x\rangle \in W = \mathrm{Span}(\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\})$ なので，$|x\rangle = \sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle$ と表される．係数の一意性を証明しよう．

$$|x\rangle = \sum_{j=1}^{k} c_j|u_j\rangle = \sum_{j=1}^{k} d_j|u_j\rangle$$

を満たす 2 つの成分の組 $\{c_j\}$ と $\{d_j\}$ を考える．このとき右辺から中央の式を引いて

$$\sum_{j=1}^{k} (d_j - c_j)|u_i\rangle = \mathbf{0}$$

となるが，基底は線形独立なので，すべての j に対して $d_j - c_j = 0$ が成り立つ．　∎

定理 1.1 から，k 次元ベクトル空間 W において，$\ell > k$ であれば W の ℓ 個のベクトルは線形従属となる．対偶をとると，W において線形独立なベクトルが ℓ 個あれば $\ell \leq k$ が成り立つ．

例題 1.2　$\mathbb{C}^3$ の部分集合 $W = \{|x\rangle \in \mathbb{C}^3 \mid x_1 - ix_2 + x_3 = 0\}$ は部分空間であることを示し，その基底を 1 組求めよ．

解答：　W の元 $|x\rangle$ は $x_1 - ix_2 + x_3 = 0$ を満たすので，x_3 を消去すると

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ix_2 - x_1 \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}$$

と表される．$W = \mathrm{Span}(\{(1,0,-1)^t, (0,1,i)^t\})$ であり，W は $\mathbb{C}^3$ の部分空間である．ここで，$(1,0,-1)^t$ と $(0,1,i)^t$ は線形独立なので，これらが W の基底である．□

$\mathbb{C}^n$ は $\mathbb{C}$ 上のベクトル空間としての次元は n であるが，$\mathbb{R}$ 上のベクトル空間とみることもでき，その次元は $2n$ である．一般に，$\mathbb{C}^n$ の部分空間 W は $\mathbb{R}$ 上のベクトル空間とみることもでき，その次元は $2\dim_{\mathbb{C}}W$ である．

問 1.4 (1) $(1,0,1)^t$, $(0,-1,-1)^t$, $(1,1,0)^t$ は $\mathbb{C}^3$ の基底となることを示せ．
(2) $\mathbb{C}^3$ の部分空間 $W = \{|x\rangle \in \mathbb{C}^3 \mid 2x_1 + x_2 + 3ix_3 = 0\}$ の基底を 1 組求めよ．

1-5　双対空間とブラ

数学や物理学において，ベクトル空間だけではなくその上の線形関数を考えることが重要である．その全体の集合として双対空間を，その元の具体化としてブラを導入する．また，その応用例として定積分を扱う．

1-5-1　双 対 空 間

W を K^n の部分空間とする．W から K への関数 $\alpha\colon W \longrightarrow K$ が線形性

$$\alpha(c_1|x\rangle + c_2|y\rangle) = c_1\alpha(|x\rangle) + c_2\alpha(|y\rangle) \quad (|x\rangle,\ |y\rangle \in W,\ c_1,\ c_2 \in K)$$

を満たすとき，α を線形関数という．W の線形関数 α, β と $c \in K$ に対して，和とスカラー倍を

$$(\alpha + \beta)(|x\rangle) := \alpha(|x\rangle) + \beta(|x\rangle),$$
$$(c\alpha)(|x\rangle) := c\alpha(|x\rangle)$$

で定義すると，これらは再び線形関数となり，W の線形関数全体の集合はベクトル空間になることがわかる．これを W^* と表し，W の双対空間[5)]という．特に，K^n の双対空間を K^{n*} と表す．

1-5-2　ブ　　ラ

K^n の線形関数 α を具体的に成分で表すために，n 個の K の元を横に並べたベクトル $\langle\alpha|$ を導入する：

5)　「双対」は「そうつい」と読む．

$$\langle\alpha| = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \langle e_j^0| \quad (\alpha_1, \dots, \alpha_n \in K).$$

ただし，

$$\langle e_1^0| := (1, 0, \dots, 0), \quad \langle e_2^0| := (0, 1, \dots, 0), \quad \dots,$$
$$\langle e_n^0| := (0, 0, \dots, 1) \tag{1.4}$$

とおく．この横ベクトル $\langle\alpha|$ を，ケットに対しブラまたはブラ・ベクトルという．ブラ $\langle\alpha| = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ とケット $|x\rangle = (x_1, \dots, x_n)^t$ に対して，$1 \times n$ 行列と $n \times 1$ 行列の積 (2-1-1 項参照) から内積を定義することができる[6)]：

$$\langle\alpha|x\rangle := (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j.$$

このブラ $\langle\alpha|$ が線形関数であることを確かめよう：

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|(c_1|x\rangle + c_2|y\rangle) &= \langle\alpha|c_1 x + c_2 y\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{n} \alpha_j (c_1 x_j + c_2 y_j) \\
&= c_1 \sum_{j=1}^{n} \alpha_j x_j + c_2 \sum_{j=1}^{n} \alpha_j y_j \\
&= c_1 \langle\alpha|x\rangle + c_2 \langle\alpha|y\rangle \quad (|x\rangle, |y\rangle \in K^n,\ c_1, c_2 \in K).
\end{aligned}$$

逆に，線形関数 α に対して，ブラを対応させよう．α の線形性から，その任意のベクトル $|x\rangle = \sum_{j=1}^{n} x_j |e_j^0\rangle$ への作用は，各標準基底ベクトル $|e_j^0\rangle$ への作用から一意的に決まる：

$$\alpha(|x\rangle) = \alpha\left(\sum_{j=1}^{n} x_j |e_j^0\rangle\right) = \sum_{j=1}^{n} x_j \alpha(|e_j^0\rangle).$$

そこで $\alpha_j := \alpha(|e_j^0\rangle)$ $(j = 1, \dots, n)$ とおき，$\langle\alpha| := (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ とすると，

$$\alpha(|x\rangle) = \sum_{j=1}^{n} x_j \alpha_j = \langle\alpha|x\rangle$$

---

6)　$\langle\alpha|$ と $|x\rangle$ の内積なので $\langle\alpha||x\rangle$ と書いてもよいが，通常 $\langle\alpha|x\rangle$ と表す．

となり，線形関数 α からブラ $\langle\alpha|$ が定まることがわかる．

このように，線形関数とブラとは1対1に対応する．ブラを双対ベクトルともいう．したがって，ブラを用いると K^n の双対空間は

$$K^{n*} = \{\langle\alpha| = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \mid \alpha_1, \dots, \alpha_n \in K\}$$

と表される．(1.4) のブラ・ベクトルは双対空間 K^{n*} の基底ベクトルである．これらは K^n の標準基底ベクトルと

$$\langle e_j^0 | e_k^0 \rangle = \delta_{jk}$$

の関係にある．ここで

$$\delta_{jk} = \begin{cases} 1 & (j = k \text{ のとき}), \\ 0 & (j \neq k \text{ のとき}) \end{cases} \tag{1.5}$$

をクロネッカーのデルタという．

1-5-3　双対ベクトルとしての定積分

高々 $(n-1)$ 次の実数係数多項式

$$p(x) = p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \cdots + p_{n-1} x^{n-1}$$

の全体の集合を P_n とする．多項式の和や実数倍は再び多項式となるので，P_n はベクトル空間になることがわかる[7)]．$p(x)$ の係数をとり出して，ベクトル

$$|p\rangle = (p_0, p_1, \dots, p_{n-1})^t = \sum_{k=0}^{n-1} p_k |e_{k+1}^0\rangle \in \mathbb{R}^n$$

を対応させると，P_n を n 次元実ベクトル空間 $\mathbb{R}^n$ と同一視することができる．実際，$q(x) \in P_n$ にも $|q\rangle = (q_0,\, q_1,\, \dots,\, q_{n-1})^t \in \mathbb{R}^n$ を対応させると

$$p(x) + q(x) \longleftrightarrow\ |p\rangle + |q\rangle = (p_0 + q_0,\, p_1 + q_1,\, \dots,\, p_{n-1} + q_{n-1})^t,$$

$$cp(x) \longleftrightarrow\ c|p\rangle = (cp_0,\, cp_1,\, \dots,\, cp_{n-1})^t \quad (c \in \mathbb{R})$$

となる．

7)　一般に $\mathbb{R}$ 上の連続関数全体や区間 $[a, b]$ 上で積分可能な関数全体の集合などもベクトル空間になるが，その次元は無限大である．

ここで，P_n の双対ベクトル空間 P_n^* の 2 つの重要な元を説明する．

1 つ目は，特定の点 $x \in \mathbb{R}$ における $|p\rangle \in P_n$ の値 $p(x)$ がスカラーであることに注目するものである．$|p\rangle \longmapsto p(x)$ で定義される線形関数 $P_n \longrightarrow \mathbb{R}$ を用いて，双対ベクトル $\langle x|$ を $\langle x|p\rangle := p(x)$ によって定義する：

$$\langle x| = (1, x, x^2, \ldots, x^{n-1}) = \sum_{k=0}^{n-1} x^k \langle e_{k+1}^0|.$$

2 つ目は，$\mathbb{R}$ の区間 $[a, b]$ における定積分

$$I_{ab}(|p\rangle) := \int_a^b p(x)\, dx \quad (|p\rangle \in P_n)$$

である．$|p_1\rangle, |p_2\rangle \in P_n$, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ に対して

$$\begin{aligned} I_{ab}(c_1|p_1\rangle + c_2|p_2\rangle) &= \int_a^b [c_1 p_1(x) + c_2 p_2(x)]\, dx \\ &= c_1 I_{ab}(|p_1\rangle) + c_2 I_{ab}(|p_2\rangle) \end{aligned}$$

となるので，I_{ab} は P_n の線形関数である．この I_{ab} に対応する双対ベクトル $\langle I_{ab}|$ の成分を求めよう．関数 $p(x)$ の積分を具体的に計算すると

$$I_{ab}(|p\rangle) = p_0(b-a) + \frac{p_1}{2}(b^2 - a^2) + \frac{p_2}{3}(b^3 - a^3) + \cdots + \frac{p_{n-1}}{n}(b^n - a^n)$$

となるので，内積の定義 $\langle I_{ab}|p\rangle = I_{ab}(|p\rangle)$ から

$$\begin{aligned} \langle I_{ab}| &= \left(b-a, \frac{1}{2}(b^2 - a^2), \frac{1}{3}(b^3 - a^3), \ldots, \frac{1}{n}(b^n - a^n)\right) \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{b^k - a^k}{k} \langle e_k^0| \end{aligned}$$

であることがわかる．

この応用として，定積分のサンプリング定理を証明しよう．

定理 1.2　$[a, b]$ を $\mathbb{R}$ の区間とし，互いに異なる n 点 $t_1, t_2, \ldots, t_n \in \mathbb{R}$ をとる．このとき，n 個の実数 $w_1, w_2, \ldots, w_n$ が存在して，任意の高々 $(n-1)$ 次の多項式 $p(x) \in P_n$ に対して，

$$\int_a^b p(x)\, dx = \sum_{j=1}^{n} w_j p(t_j) \tag{1.6}$$

が成り立つ．ここで $w_1, w_2, \ldots, w_n$ は p には依存していないことに注意せよ．

証明： $\langle I_{ab}|$ は，各基底ベクトル $|e_k^0\rangle$ に対する作用が決まれば，線形性からすべての多項式 $p(x) \in P_n$ に対する作用がわかる．$|e_k^0\rangle$ $(k = 1, 2, \ldots, n)$ に対応する多項式は x^{k-1} なので，(1.6) において $p(x) = x^{k-1}$ とすると $w_1, w_2, \ldots, w_n$ を未知数とする連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{n} {t_j}^{k-1} w_j = \frac{b^k - a^k}{k} \qquad (1 \leq k \leq n)$$

が得られる．これを行列表示すると，

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ t_1 & t_2 & \ldots & t_n \\ {t_1}^2 & {t_2}^2 & \ldots & {t_n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ {t_1}^{n-1} & {t_2}^{n-1} & \ldots & {t_n}^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - a \\ \frac{1}{2}(b^2 - a^2) \\ \frac{1}{3}(b^3 - a^3) \\ \vdots \\ \frac{1}{n}(b^n - a^n) \end{pmatrix}$$

となる．この係数行列はファンデルモンド行列とよばれる (定義 2.10 参照)．$t_1, t_2, \ldots, t_n$ が互いに異なるので，定理 2.6 からその行列式は 0 にはならない．よって，係数行列には逆行列が存在し，(1.6) を満たす $w_1, w_2, \ldots, w_n \in \mathbb{R}$ が p と独立に一意的に定まる． ∎

1-6 ベクトルの内積

1-6-1 内積と計量

1-5 節では，ベクトルと双対ベクトルの内積を定義した．では，ベクトルどうしの内積はどのように定義すればよいだろうか．じつはそれにはもう一つ必要なステップがある．それはベクトルと双対ベクトルの間に対応関係をつけることである．例として，2 次元平面 $\mathbb{R}^2$ における長さの定義を思い出そう．直交座標系では微小変位 (dx, dy) の長さは $ds = \sqrt{dx^2 + dy^2}$, すなわち

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 = (dx, dy) \begin{pmatrix} dx \\ dy \end{pmatrix}$$

で定義された．

一方，極座標系では微小変位 $(dr, d\theta)$ の長さは $ds = \sqrt{dr^2 + r^2 d\theta^2}$, すな

わち

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 = \left(dr, r^2 d\theta\right) \begin{pmatrix} dr \\ d\theta \end{pmatrix}$$

で定義された．このように，ベクトルの長さを測るときは座標系によって長さの測り方が異なる．このとき，ケット $(dx, dy)^t$ に対応するブラは (dx, dy) であるのに対して，ケット $(dr, d\theta)^t$ に対応するブラは $(dr, r^2 d\theta)$ となるのである．

ここでは，直交座標系の内積に対応するユークリッド計量を考える．ただし，複素ベクトルを考えるときには，ベクトルの長さが実数となるように，転置に加えて複素共役をとる (例 2.1 参照)．すなわち，ケット $|x\rangle = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^t \in \mathbb{C}^n$ に対応するブラを $\langle x| := (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) \in \mathbb{C}^{n*}$ で定義する．ただし $*$ は複素共役を表す[8)]．このとき，

$$\langle x|x\rangle = (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 \geq 0$$

となるので，$|x\rangle$ の絶対値 $\||x\rangle\|$ を非負の実数 $\||x\rangle\| = \sqrt{\langle x|x\rangle}$ で定義することができる．このようにして定義された絶対値はノルムの公理

(1) (非負値性)　$\||v\rangle\| \geq 0$　$(|v\rangle \in \mathbb{C}^n)$，等号成立は $|v\rangle = \mathbf{0}$ のときのみ
(2) (斉次性)　$\|a|v\rangle\| = |a|\,\||v\rangle\|$　$(a \in \mathbb{C},\ |v\rangle \in \mathbb{C}^n)$
(3) (三角不等式)　$\||u\rangle + |v\rangle\| \leq \||u\rangle\| + \||v\rangle\|$　$(|u\rangle,\ |v\rangle \in \mathbb{C}^n)$

を満たしている．(3) を示すには，後に示す定理 1.3 を用いる．

このケットとブラの対応関係を使うことにより，2 つのベクトル $|x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n$ に対して，内積 $\langle x|y\rangle$ を定義することができる：

$$\langle x|y\rangle := (x_1^*, x_2^*, \ldots, x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^{n} x_j^* y_j. \tag{1.7}$$

8)　物理学では複素数 z の複素共役を z^* で，行列 A エルミート共役を $A^\dagger$ で表すが，数学では複素共役を $\bar{z}$ で，エルミート共役を A^* で表すことが多いので注意されたい．

すなわち，最初のケットをブラに写像し，そのブラと 2 番目のケットとの内積をとるのである．

ブラとケットの積はスカラーであったが，ケット $|x\rangle \in \mathbb{C}^n$ とブラ $\langle y| \in \mathbb{C}^{n*}$ を行列の積の規則に従って積をとると，その結果は $n \times n$ 行列となる：

$$|x\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1, y_2, \dots, y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 & \dots & x_1 y_n \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 & \dots & x_2 y_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n y_1 & x_n y_2 & \dots & x_n y_n \end{pmatrix}.$$

問 1.5 $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$, $|x\rangle, |y_1\rangle, |y_2\rangle \in \mathbb{C}^n$ とする．次の準双線形性[9)]を示せ：

$$\langle x|c_1 y_1 + c_2 y_2\rangle = c_1 \langle x|y_1\rangle + c_2 \langle x|y_2\rangle,$$
$$\langle c_1 y_1 + c_2 y_2|x\rangle = c_1^* \langle y_1|x\rangle + c_2^* \langle y_2|x\rangle.$$

問 1.6 $|x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n$ とする．次の等式を示せ：

$$\langle x|y\rangle = \langle y|x\rangle^*.$$

問 1.7 2 つのベクトル $|x\rangle = (1, 1+i, i)^t$, $|y\rangle = (i, 1-i, 1+i)^t$ に対して，$\||x\rangle\|, \langle x|y\rangle, \langle y|x\rangle$ および $|x\rangle\langle y|$ の値をそれぞれ求めよ．

1-6-2 コーシー–シュワルツの不等式

量子力学のみならず，物理学や数学のあらゆる分野で頻用される不等式にコーシー–シュワルツの不等式がある．高等学校のベクトルで学ぶように，2 つのベクトル $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^2$ の内積は，不等式

$$|\vec{x} \cdot \vec{y}| = ||\vec{x}||\vec{y}|\cos\theta| \le |\vec{x}||\vec{y}|$$

を満たす．ただし，$|\vec{x}|$ は $\vec{x}$ の長さ，θ は $\vec{x}$ と $\vec{y}$ のなす角度である．これは次のように一般化される．

定理 1.3 $|x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n$ とする．このとき，不等式

$$|\langle x|y\rangle| \le \||x\rangle\| \, \||y\rangle\| \tag{1.8}$$

9) 英語で sesquilinear という (sesqui=1.5 を意味する)．ケットのほうについては通常の線形であるが，ブラのほうについては係数の複素共役がとられることに注意せよ．

が成り立つ．等号が成立するのは，一方のベクトルが $\mathbf{0}$ であるか，$|x\rangle = c|y\rangle$ となる $c \in \mathbb{C}$ が存在するとき，すなわち $|x\rangle$ と $|y\rangle$ が平行となるときである．

証明： $|y\rangle = \mathbf{0}$ または $\langle x|y\rangle = 0$ のとき，(1.8) は明らかに成り立つので，$|y\rangle \neq \mathbf{0}$ かつ $\langle x|y\rangle \neq 0$ のときを考える．$t \in \mathbb{R}$ に対して，

$$|z\rangle := \langle x|y\rangle|x\rangle + t|y\rangle$$

とおく．$\langle y|x\rangle = \langle x|y\rangle^*$ に注意すると，任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して，

$$0 \leq \langle z|z\rangle = |\langle x|y\rangle|^2\langle x|x\rangle + 2|\langle x|y\rangle|^2 t + t^2\langle y|y\rangle \tag{1.9}$$

が成り立つので，$\langle y|y\rangle > 0$ に注意すると，右辺を 0 としたときの t についての 2 次方程式の判別式は

$$|\langle x|y\rangle|^4 - |\langle x|y\rangle|^2\langle x|x\rangle\langle y|y\rangle \leq 0$$

を満たす．$|\langle x|y\rangle|^2 \neq 0$ なので，

$$|\langle x|y\rangle|^2 \leq \langle x|x\rangle\langle y|y\rangle$$

が得られ，(1.8) が成り立つ．等号は，(1.9) において等号が成り立つ $t \in \mathbb{R}$ が存在するとき，すなわち $|z\rangle = \mathbf{0}$ のときのみ成り立つ．これは，$|x\rangle = c|y\rangle$ となる $c \in \mathbb{C}$ が存在するときである．∎

射影演算子 (4-2 節参照) を用いて，$|y\rangle$ から $|x\rangle$ 方向の成分を引いたものを考えることで証明の見通しがよくなるが，この証明と本質的には同じである．

コーシー–シュワルツの不等式により，$\mathbf{0}$ でない 2 つの実ベクトル $|x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{R}^n$ に対して，そのなす角を

$$\cos\theta = \frac{\langle x|y\rangle}{\||x\rangle\|\||y\rangle\|}$$

を満たす θ $(-\pi \leq \theta \leq \pi)$ で定義することができる．

2. 行列と行列式

2-1 行　列

数を長方形の形に並べたものが行列である．行列は多くの情報を同時に扱ったり，多くの未知数を含む連立 1 次方程式を場当たり的ではなくシステマティックに解くことができるなど多岐にわたる応用をもつ．さらには，微分や積分などの線形演算子もじつは行列として理解することができ (5-2 節参照)，行列は数学や物理学の高度な理論を学ぶのに中心的な役割を果たしている．なかでもエルミート行列は特に重要であり，量子力学では位置，運動量，エネルギーなどの物理量はすべてエルミート行列や，それを一般化したエルミート演算子で表される．本書では主に複素行列を扱う．

2-1-1 行列の定義

$A_{ij} \in \mathbb{C}$ $(1 \leq i \leq m,\ 1 \leq j \leq n)$ とする．

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{pmatrix}$$

を $m \times n$ 行列といい，$A = (A_{ij})$ と表す．その全体の集合を $M(m,n;\mathbb{C})$ で表す．A_{ij} を (i,j) 行列要素という．

2 つの行列 $A = (A_{ij}), B = (B_{ij}) \in M(m,n;\mathbb{C})$ の和 $A+B$ とスカラー倍 cA $(c \in \mathbb{C})$ を，行列要素ごとの和，スカラー倍，すなわち

$$A+B:=(A_{ij}+B_{ij}),\quad cA:=(cA_{ij})$$

で定義すると，$M(m,n;\mathbb{C})$ は $\mathbb{C}$ 上の mn 次元ベクトル空間になる．すべての行列要素が 0 である行列を零行列といい，O または $O_{m,n}$ で表す．これが，ベクトル空間 $M(m,n;\mathbb{C})$ のゼロ・ベクトルである．

$A\in M(m,n;\mathbb{C})$, $B\in M(n,p;\mathbb{C})$ に対して，積 AB を，(i,j) 行列要素が

$$(AB)_{ij}:=\sum_{k=1}^{n}A_{ik}B_{kj}$$

で定義される $m\times p$ 行列とする．2 つの行列の積はいつでも定義できるとは限らない．定義できるのは，A の列数と B の行数が等しいときのみである．$n\times n$ 行列を n 次正方行列といい，その全体の集合を $M(n;\mathbb{C})$ で表す．$M(n;\mathbb{C})$ は和，スカラー倍だけでなく，積についても閉じている．正方行列に対しては，跡，内積 (2-1-3 項参照)，行列式 (2-3 節参照) などの重要な量が定義される．

行列 A, $B\in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$[A,B]:=AB-BA$$

を A, B の交換子または交換関係という．$[A,B]=O$ のとき，A と B は可換，または交換するという．2 つの行列はいつでも可換とは限らないので注意が必要である．

$A_{ij}=\delta_{ij}$ となる n 次正方行列を単位行列といい，I または I_n で表す．δ_{ij} は (1.5) で定義されたクロネッカーのデルタである．このとき，$A\in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$AI=IA=A$$

が成り立つ．また，

$$AB=BA=I$$

を満たす $B\in M(n;\mathbb{C})$ を A の逆行列といい，A^{-1} で表す．逆行列をもつ行列 A を正則行列といい，その全体の集合を $\mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ で表す．

命題 2.1　A, $B\in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，$AB\in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ であり，

$$(A^{-1})^{-1}=A,\quad (AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$$

が成り立つ．

証明： $(A^{-1})^{-1} = A$ は定義から従う．また，$(AB)(B^{-1}A^{-1}) = AIA^{-1} = AA^{-1} = I$ となるので，$AB \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ であり，$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ が成り立つ． ∎

命題 2.1 より，$\mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ は群[1]となる．これを複素一般線形群という．

2-1-2 転置，エルミート共役

定義 2.1 $m \times n$ 行列 $A = (A_{ij}) \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，各 (i,j) 行列要素が A_{ji} である $n \times m$ 行列を A の転置行列といい，A^t で表す．

命題 2.2 $A \in M(m,n;\mathbb{C}), B \in M(n,p;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$(A^t)^t = A, \quad (AB)^t = B^t A^t.$$

証明： 転置を 2 回繰り返すと $(i,j) \longmapsto (j,i) \longmapsto (i,j)$ となり，$(A^t)^t = A$ が成り立つ．また，$(AB)^t$ の (i,j) 行列要素は $\sum_{k=1}^{n} A_{jk}B_{ki}$ であり，$B^t A^t$ の (i,j) 行列要素は

$$\begin{aligned}(B^t A^t)_{ij} &= \sum_{k=1}^{n} (B^t)_{ik}(A^t)_{kj} \\ &= \sum_{k=1}^{n} B_{ki}A_{jk} = \sum_{k=1}^{n} A_{jk}B_{ki} = (AB)_{ji} = ((AB)^t)_{ij}\end{aligned}$$

となるので，$(AB)^t = B^t A^t$ が成り立つ． ∎

定義 2.2 $A = (A_{ij}) \in M(n;\mathbb{C})$ とする．$A^t = A$, すなわち任意の行列要素が $A_{ji} = A_{ij}$ を満たす行列 A を対称行列という．

一般に，行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$(A + A^t)/2$ は対称行列になる．

定義 2.3 $m \times n$ 行列 $A = (A_{ij}) \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，各 (i,j) 行列要素が A_{ji}^* である $n \times m$ 行列を A のエルミート共役といい，$A^\dagger$ で表す．

---

1) 1 つの演算について閉じていて，単位元をもち，逆元が必ず存在する集合を群という．

$A,\ B \in M(m,n;\mathbb{C}),\ c \in \mathbb{C}$ に対して，

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger, \quad (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

が成り立つことがわかる．

例 2.1　$|x\rangle \in \mathbb{C}^n$ に対して，

$$|x\rangle^\dagger = (x_1^*, \ldots, x_n^*) = \langle x|$$

が成り立つ．すなわち，ケット・ベクトルから対応するブラ・ベクトルを求めることは，ケット・ベクトルのエルミート共役をとることにほかならない．同様に，ブラ・ベクトルのエルミート共役は，対応するケット・ベクトルになる．

問 2.1　$A = \begin{pmatrix} i & 0 & 1 \\ 3 & 1+i & 2 \\ 1-i & 4 & 1 \end{pmatrix}$ に対して，$A^\dagger$ を求めよ．

複素共役と転置の性質から，次が得られる．

命題 2.3　$A \in M(m,n;\mathbb{C}),\ B \in M(n,p;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger.$$

定義 2.4　$A = (A_{ij}) \in M(n;\mathbb{C})$ とする．$A^\dagger = A$, すなわち任意の行列要素が $A_{ji}^* = A_{ij}$ を満たす行列 A をエルミート行列という．

例えば

$$\begin{pmatrix} 1 & 1+i & -i \\ 1-i & 2 & 3i \\ i & -3i & 1 \end{pmatrix}$$

はエルミート行列である．このようにエルミート行列の対角要素は実数である．一般の行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$(A+A^\dagger)/2$ はエルミート行列になる．また，2 つのエルミート行列 $A, B \in M(n;\mathbb{C})$ の積 AB は

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$$

となり，これは $AB = BA$ を満たすときのみエルミート行列となる．

定義 2.5 $U^\dagger = U^{-1}$ を満たす $U \in M(n;\mathbb{C})$ をユニタリー行列という．また，$\det U = 1$ であるユニタリー行列 U を特殊ユニタリー行列という．

ユニタリー行列全体の集合は積に関して閉じている．実際，ユニタリー行列 $U_1, U_2 \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$(U_1U_2)^\dagger = U_2^\dagger U_1^\dagger = U_2^{-1}U_1^{-1} = (U_1U_2)^{-1}$$

となり，U_1U_2 はユニタリー行列である．単位行列 I_n もユニタリー行列である．ユニタリー行列 U の逆元 U^{-1} は $U^\dagger$ である．したがって，ユニタリー行列全体の集合は群となる．この群を**ユニタリー群**といい，$\mathrm{U}(n)$ で表す．ユニタリー行列 U は

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I_n$$

を満たすので，行列式の性質 (定理 2.3 参照) より，$|\det U| = 1$ である．したがって，$\det U = e^{i\theta}$ $(\theta \in \mathbb{R})$ と表される．

同様に，特殊ユニタリー行列全体の集合も積に関して閉じている．実際，特殊ユニタリー行列 $U_1, U_2 \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$\det(U_1U_2) = \det U_1 \det U_2 = 1 \cdot 1 = 1$$

となり，U_1U_2 は特殊ユニタリー行列である．単位行列 I_n も特殊ユニタリー行列である．特殊ユニタリー行列 U の逆元 U^{-1} は

$$\det(U^{-1}) = (\det U)^{-1} = 1$$

を満たす．したがって，特殊ユニタリー行列全体の集合も群となる．この群を**特殊ユニタリー群**といい，$\mathrm{SU}(n)$ で表す．

実数を行列要素にもつ行列に関しても同様の群が存在する．すべての行列要素が実数であるユニタリー行列，特殊ユニタリー行列をそれぞれ**直交行列**，**特殊直交行列**という．それぞれの全体の集合は群となる．これらの群をそれぞれ**直交群**，**特殊直交群**といい，$\mathrm{O}(n)$, $\mathrm{SO}(n)$ で表す．

行列の群としては，ここにあげた $\mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$, $\mathrm{U}(n)$, $\mathrm{SU}(n)$, $\mathrm{O}(n)$, $\mathrm{SO}(n)$ 以外にも，次のものなどが知られている：

実一般線形群： $\mathrm{GL}(n;\mathbb{R}) := \{A \in M(n;\mathbb{R}) \mid \det A \neq 0\}.$

実特殊線形群：　$\mathrm{SL}(n;\mathbb{R}) := \{A \in M(n;\mathbb{R}) \mid \det A = 1\}.$

複素特殊線形群：　$\mathrm{SL}(n;\mathbb{C}) := \{A \in M(n;\mathbb{C}) \mid \det A = 1\}.$

問 2.2　$\mathrm{O}(n)$, $\mathrm{SO}(n)$, $\mathrm{SL}(n;\mathbb{C})$ が群となることを確かめよ．

問 2.3　エルミート行列 $H \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$U := (I+iH)(I-iH)^{-1}$ はユニタリー行列であることを示せ．この H から U を導く変換をケーリー変換という．

2-1-3　跡

定義 2.6　正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，その対角要素の和

$$\mathrm{tr}\,A := \sum_{j=1}^{n} A_{jj}$$

を A の跡[2)]といい，$\mathrm{tr}\,A$ で表す．

跡はサイクリック不変性，すなわち，

$$\mathrm{tr}\,(AB) = \mathrm{tr}\,(BA) \quad (A,\, B \in M(n;\mathbb{C})), \tag{2.1}$$

$$\mathrm{tr}\,(A_1A_2\cdots A_k) = \mathrm{tr}\,(A_kA_1\cdots A_{k-1}) \quad (A_1,\,\ldots,\,A_k \in M(n;\mathbb{C}))$$

を満たす．(2.1) は $A \in M(m,n;\mathbb{C})$, $B \in M(n,m;\mathbb{C})$ に対しても成り立つ．

問 2.4　(2.1) を示せ．

量子力学の調和振動子において生成消滅演算子の交換関係 $[a, a^\dagger] = I$ をみて不思議に思った読者もいるかもしれない (著者もそうであった)．両辺の跡をとると

$$\mathrm{tr}\,(aa^\dagger) - \mathrm{tr}\,(a^\dagger a) = \mathrm{tr}\,I$$

であるが，左辺は跡のサイクリック不変性から 0 であり，右辺は線形独立な調和振動子の固有関数は無限にとれることから無限大となる！　しかし，じつは左辺は 0 ではなく，矛盾は起こらない．無限次元のベクトル空間を扱う場合には，跡のサイクリック不変性を満たすのは「トレースクラス」に属する演算子だけであり，一般の演算子はサイクリック不変性を満たさない．

2)　「跡」は「せき」と読む．綴り trace のまま「トレース」ということが多い．

正方行列 $A, B \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$\langle A, B\rangle := \mathrm{tr}\,(A^\dagger B) = \sum_{i,j=1}^{n} A_{ij}^* B_{ij}$$

と定義すると，これはベクトルの内積 (1.7) の一般化であり，ベクトル空間 $M(n;\mathbb{C})$ の内積となる．これをヒルベルト–シュミット内積という．

2-1-4 ブロック行列

行列は数を長方形に並べたものであるが，いくつかの数をまとめて眺めてみると，小さな行列が長方形に並んでいるとみることもできる．逆に，行列を長方形に並べることで新しく大きなサイズの行列をつくることも重要である．例えば，$A \in M(m;\mathbb{C}), B \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$\begin{pmatrix} A & O_{m,n} \\ O_{n,m} & B \end{pmatrix}$$

をブロック対角行列といい，$A \oplus B$ で表す．3 個以上でも同様で，例えば

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (1) \oplus \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \oplus (1)$$

と表す．

例 2.2 $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ に対して，

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I_2, \quad \sigma_x\sigma_z = -i\sigma_y, \quad \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y$$

が成り立つ．

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -i \\ 1 & 0 & i & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ i & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -1-i \\ 0 & 2 & 1+i & 0 \\ 0 & 1-i & 2 & 0 \\ -1+i & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

であり，ブロック行列の積について

$$\begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y \\ \sigma_z & I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_z \\ \sigma_y & I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 + \sigma_y^2 & \sigma_x\sigma_z + \sigma_y \\ \sigma_z\sigma_x + \sigma_y & \sigma_z^2 + I_2 \end{pmatrix}$$

が成り立つ.

例 2.2 のように，ブロック行列の積は各ブロックの行列を数のように扱って行列の積を計算することができる．ただし，行列の積が定義できるようにブロック分けされていなければならないし，積の順を変えることはできない．この例 2.2 に現れた $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ をパウリ行列という (7-3 節参照).

2-1-5　行列のテンソル積

定義 2.7　$A = (A_{ij}) \in M(m, n; \mathbb{C})$, $B \in M(p, q; \mathbb{C})$ に対して,

$$\begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \dots & A_{mn}B \end{pmatrix} \in M(mp, nq; \mathbb{C})$$

を A と B のテンソル積といい，$A \otimes B$ で表す.

例題 2.1　$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ に対して，$\sigma_x \otimes I_2$ と $I_2 \otimes \sigma_x$ を求め，その関係を考察せよ.

解答：定義から

$$\sigma_x \otimes I_2 = \begin{pmatrix} O & I_2 \\ I_2 & O \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$I_2 \otimes \sigma_x = \begin{pmatrix} \sigma_x & O \\ O & \sigma_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる．$\sigma_x \otimes I_2 \neq I_2 \otimes \sigma_x$ であるが，$\sigma_x \otimes I_2$ の 2 行目と 3 行目を交換し，2 列目と 3 列目を交換すると，$I_2 \otimes \sigma_x$ となる.　□

一般に，$A \otimes B \neq B \otimes A$ である.

例 2.3 $|u\rangle = (a,b)^t$, $|v\rangle = (c,d)^t$ に対して,

$$|u\rangle \otimes |v\rangle = \begin{pmatrix} a|v\rangle \\ b|v\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ ad \\ bc \\ bd \end{pmatrix}, \quad |v\rangle \otimes |u\rangle = \begin{pmatrix} c|u\rangle \\ d|u\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac \\ bc \\ ad \\ bd \end{pmatrix}$$

となる.

ベクトルのテンソル積 $|u\rangle \otimes |v\rangle$ を，しばしば $|u\rangle|v\rangle$ や $|uv\rangle$ で表すこともある．ただし，一般の行列では $A \otimes B$ を AB と表すと通常の行列の積と区別できないので，決してこのような省略はしない.

すべての $(mp)\times(nq)$ 行列が $m\times n$ 行列と $p\times q$ 行列のテンソル積で表されるわけではない．実際，$(mp)\times(nq)$ 行列の独立な行列要素の数は $mnpq$ であるのに対して，$m\times n$ 行列と $p\times q$ 行列の独立な行列要素の合計数は $mn+pq$ であり，一般の $(mp)\times(nq)$ 行列のなかには $A\otimes B$ と分解できない行列が存在するのである．m,n,p,q が大きくなると $mnpq \gg mn+pq$ となり，ほとんどの行列は 2 つの行列のテンソル積では表せないことがわかる.

命題 2.4 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\mathrm{tr}\,(A\otimes B) = \mathrm{tr}\,A \cdot \mathrm{tr}\,B.$$

証明： 跡とテンソル積の定義より

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}\,(A\otimes B) &= \mathrm{tr}\begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1m}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2m}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \dots & A_{mm}B \end{pmatrix} \\
&= A_{11}\ \mathrm{tr}\,B + A_{22}\ \mathrm{tr}\,B + \cdots + A_{mm}\ \mathrm{tr}\,B \\
&= \mathrm{tr}\,A \cdot \mathrm{tr}\,B
\end{aligned}$$

となる. ∎

問 2.5 $A \in M(m,n;\mathbb{C})$, $B \in M(p,q;\mathbb{C})$, $C \in M(n,r;\mathbb{C})$, $D \in M(q,s;\mathbb{C})$ に対して，

$$(A\otimes B)(C\otimes D) = (AC)\otimes(BD) \tag{2.2}$$

を示せ.

(2.2) は，次のように一般化される：

$$(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2)\cdots(A_N \otimes B_N) = (A_1 A_2 \cdots A_N) \otimes (B_1 B_2 \cdots B_N).$$

ただし，行列は積が意味をもつように与えてあるものとする.

問 2.6　(1)　次の等式を示せ：

$$A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C \quad (A \in M(m,n;\mathbb{C}),\ B, C \in M(p,q;\mathbb{C})),$$

$$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger \quad (A \in M(m,n;\mathbb{C}),\ B \in M(p,q;\mathbb{C})),$$

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1} \quad (A \in \mathrm{GL}(m;\mathbb{C}),\ B \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})).$$

(2)　エルミート行列 A, B に対して，$A \otimes B$ はエルミート行列であることを示せ.

(3)　ユニタリー行列 A, B に対して，$A \otimes B$ はユニタリー行列であることを示せ.

2-2　行列の階数

$A \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，

(1)　第 i 行と第 j 行を入れ替える，

(2)　第 i 行を c $(\neq 0)$ 倍する，

(3)　第 i 行を c 倍して，第 j 行に加える，

を行の基本操作，

(1)　第 i 列と第 j 列を入れ替える，

(2)　第 i 列を c $(\neq 0)$ 倍する，

(3)　第 i 列を c 倍して，第 j 列に加える，

を列の基本操作という.

これらを用いて行列要素の「掃き出し」を繰り返すと

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \ldots & A_{2n} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \ldots & A_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & A_{m3} & \ldots & A_{mn} \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & B_{22} & B_{23} & \ldots & B_{2n} \\ 0 & B_{32} & B_{33} & \ldots & B_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & B_{m2} & B_{m3} & \ldots & B_{mn} \end{pmatrix}$$

$$
\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} & \dots & C_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & C_{m3} & \dots & C_{mn} \end{pmatrix} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \begin{pmatrix} I_r & O_{r,n-r} \\ O_{m-r,r} & O_{m-r,n-r} \end{pmatrix}
$$

と最終的に変形できる．この r は基本操作の順によらず定まることが知られている．r を A の階数またはランクといい，$\operatorname{rank} A$ で表す．

階数は行列を特徴づける重要な量の一つである．対角化可能な正方行列に対しては，階数は 0 でない固有値の個数に等しく (6 章参照)，一般の行列に対しては，階数は特異値の個数と等しい (8-2-1 項参照)．さらに，階数はベクトルの線形独立性を知るうえでも重要である．

定理 2.1 行列 $A = (A_{ij}) \in M(m, n; \mathbb{C})$ に対して，その列ベクトルを $|v_j\rangle = (A_{1j}, A_{2j}, \dots, A_{mj})^t$ $(j = 1, 2, \dots, n)$, 行ベクトルを $\langle u_i| = (A_{i1}, A_{i2}, \dots, A_{in})$ $(i = 1, 2, \dots, m)$ とする．このとき，$\operatorname{rank} A$ は次に等しい：

(1) $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ の線形独立なベクトルの最大個数
(2) $\dim \operatorname{Span}(\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\})$
(3) $\{\langle u_1|, \langle u_2|, \dots, \langle u_m|\}$ の線形独立なベクトルの最大個数
(4) $\dim \operatorname{Span}(\{\langle u_1|, \langle u_2|, \dots, \langle u_m|\})$

例 2.4 行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & i \\ 2 & 4 & 0 \end{pmatrix}$ に掃出し法を行うと

$$
A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & i \\ 2 & 4 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & i \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}
$$

となり，$\operatorname{rank} A = 2$ である．3 つの列ベクトル $(1, 2)^t$, $(2, 4)^t$, $(i, 0)^t$ の組は線形従属であり (1-3 節参照)，$(1, 2)^t$, $(i, 0)^t$ は線形独立である．また，2 つの行ベクトル $(1, 2, i)$, $(2, 4, 0)$ は自明でない関係式をもたないので線形独立である．

2-3 行 列 式

正方行列が逆行列をもつかどうかを判定する量の一つに行列式がある．行列式はそれだけではなく，逆行列の行列要素を具体的に計算したり，行ベクトルの張る平行四辺形や平行六面体などの図形の体積を計算することもできる．まず，行列式の定義に必要な置換と符号の復習からはじめよう．

2-3-1 置換と符号

定義 2.8 $1, 2, \ldots, n$ を重複なく並べ替えて得られる数列 $\sigma(1), \sigma(2), \ldots, \sigma(n)$ を n 次の**置換**という．その全体の集合を n 次**対称群**といい，S_n で表す．

$\sigma \in S_n$ は

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ \sigma(1) & \sigma(2) & \cdots & \sigma(n) \end{pmatrix}$$

という記法を用いる．$1, 2, \ldots, n$ の並べ替えである置換は全部で $n!$ 個ある．また，数の並べ替えの繰り返しで置換の積を定義すると，S_n は群になる．

2 つの数のみを交換する置換を**互換**という．任意の置換 σ は 2 つの数の入れ替えを繰り返すことで得られる，すなわち互換の積で表されることが知られている．置換の互換の積による表し方は 1 通りではないが，積に現れる互換の数が偶数か奇数かは σ によって一意的に決まることが知られており，前者を**偶置換**，後者を**奇置換**という．したがって，置換 σ の符号

$$\mathrm{sgn}(\sigma) := \begin{cases} 1 & (\sigma \text{ が偶置換}), \\ -1 & (\sigma \text{ が奇置換}) \end{cases}$$

は互換の積による表示によらずに定義される．

例 2.5 $1, 2, 3, 4 \mapsto 3, 4, 1, 2$ は 4 次の置換であり，$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ と表す．$\sigma(1) = 3,\ \sigma(2) = 4,\ \sigma(3) = 1,\ \sigma(4) = 2$ である．σ を 2 つの数の入れ替えの繰り返しで表示すると

$$1, 2, 3, 4 \longmapsto 3, 2, 1, 4 \longmapsto 3, 4, 1, 2$$

となり，2 つの互換の積で表される．また，隣どうしの数の入れ替えのみの

繰り返しで表示すると

$$1,2,3,4 \longmapsto 1,3,2,4 \longmapsto 1,3,4,2 \longmapsto 3,1,4,2 \longmapsto 3,4,1,2$$

となり，4 つの互換の積で表すこともできる．σ の符号は

$$\mathrm{sgn}(\sigma) = (-1)^2 = (-1)^4 = 1$$

である．

2-3-2 行列式の定義

正方行列 $A = (A_{ij}) \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，A の行列式 $\det A$ を

$$\det A := \sum_{\sigma \in S_n} \mathrm{sgn}(\sigma) A_{1\sigma(1)} A_{2\sigma(2)} \cdots A_{n\sigma(n)} \tag{2.3}$$

で定義する．ただし，

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ \sigma(1) & \sigma(2) & \cdots & \sigma(n) \end{pmatrix}$$

は n 次の置換であり，S_n は n 次の対称群である．$\det A$ を $|A|$ で表すこともある．

例 2.6 (1) 2 次正方行列の行列式：

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} ad + \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} bc = ad - bc.$$

(2) 3 次正方行列の行列式：

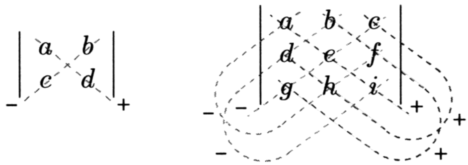
$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix}$$

$$= \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} aei + \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} cdh + \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} bfg$$

$$+ \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} ceg + \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} afh + \mathrm{sgn}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} bdi$$

$$= aei + cdh + bfg - ceg - afh - bdi.$$

(1) と (2) の結果は，次の「サラスの方法」，または「たすき掛けの公式」として記憶法が知られている：



$n \geq 4$ においては，$n = 2, 3$ のような便利な記憶法は知られていない．S_n が $n!$ 個の元をもつので $\det A$ は $n!$ 個の項の和であるが，$n \geq 4$ において仮に同じように単純なたすき掛けを考えても $2n$ 個の項しか現れず，すべての項を得るためには複雑なたすき掛けをも考える必要がある．

例 2.7 $A_{ij} = 0$ $(i > j)$ を満たす正方行列を上三角行列，$A_{ij} = 0$ $(i < j)$ を満たす正方行列を下三角行列といい，両者をあわせて三角行列という．三角行列 A の行列式の計算は簡単である．(2.3) において項

$$\mathrm{sgn}(\sigma) A_{1\sigma(1)} A_{2\sigma(2)} \cdots A_{n\sigma(n)}$$

が 0 とならないのは，σ が恒等置換 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$ のときのみであるから，行列式の値は対角要素の積

$$\det A = A_{11} A_{22} \cdots A_{nn}$$

となる．

2-3-3 ラプラス展開

$n = 2, 3$ のときのみ行列式の値はサラスの方法で求められるが，$n \geq 4$ のときに行列式の値を求める方法を考えよう．まずは，$n = 2, 3$ のときの行列式の計算を，行列の 1 行目の行列要素に注目して見直そう．

例 2.8 (1) 2 次正方行列の行列式：

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc = a \cdot d + b \cdot (-1)c.$$

(2) 3 次正方行列の行列式：

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = aei + cdh + bfg - ceg - afh - bdi$$
$$= a(ei - fh) + b(-1)(di - fg) + c(dh - eg).$$

いずれも $(1, j)$ 行列要素に，1 行目と j 列目を消去した行列の行列式がかけられていることがわかる．

定義 2.9 正方行列 $A \in M(n; \mathbb{C})$ に対して，その i 行目と j 列目を消去した $(n-1)$ 次正方行列の行列式 ($(n-1)$ 次小行列式という) に $(-1)^{i+j}$ をかけたものを A の (i, j) 余因子といい，$\widehat{A}^{ij}$ で表す．

例 2.8 を一般化すると，1 つの行または列を指定することで行列式の計算を小行列式の計算に帰着させるラプラス展開，または余因子展開が成り立つ．

定理 2.2 $1 \leq i, k \leq n$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \widehat{A}^{ij} = \sum_{j=1}^{n} \widehat{A}^{jk} A_{jk}, \tag{2.4}$$

$$0 = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \widehat{A}^{kj} = \sum_{j=1}^{n} \widehat{A}^{ji} A_{jk} \quad (i \neq k). \tag{2.5}$$

(2.4), (2.5) をまとめると

$$(\det A)\delta_{ik} = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \widehat{A}^{kj} = \sum_{j=1}^{n} A_{ji} \widehat{A}^{jk}$$

となる．クロネッカーのデルタ δ_{ik} は単位行列 I_n の行列要素なので，A が逆行列をもつための必要十分条件は $\det A \neq 0$ であり，A^{-1} の (i, j) 行列要素は

$$\left(A^{-1}\right)_{ij} = (\det A)^{-1} \widehat{A}^{ji}$$

となる．

例題 2.2 $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 0 & 3 & 2 \end{pmatrix}$ の行列式の値を求めよ．

解答： 0 が多い 2 列目でラプラス展開すると

$$\det A = (-1)^2 \cdot 3 \cdot \begin{vmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 2 \end{vmatrix} + (-1)^3 \cdot 2 \cdot \begin{vmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \end{vmatrix}$$

$$= 3 \cdot (-12) - 2(-4) = -28.$$

□

2-3-4 行列式の重要な公式

三角行列の行列式と同様に，行列式を定義からていねいに計算することで，次の重要な公式が得られる．

定理 2.3 (1) 積の公式：$A, B \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det(AB) = \det A \cdot \det B.$$

特に，A が逆行列をもつための必要十分条件は $\det A \neq 0$ であり，このとき次が成り立つ：

$$\det(A^{-1}) = (\det A)^{-1}.$$

(2) 転置行列の行列式： $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det(A^t) = \det A.$$

(3) 基本操作と行列式：

(3-1) 第 i 行と第 j 行を入れ替えると，行列式の値は (-1) 倍になる，

(3-2) 第 i 行を c 倍すると，行列式の値は c 倍になる，

(3-3) 第 i 行を c 倍して第 j 行に加えても，行列式の値は変わらない．

特に，行ベクトルの組が線形従属であることと行列式の値が 0 であることは同値である．列の基本操作についても同様である．

ブロック行列の行列式についても，行列式の定義からていねいに計算することで，次の重要な公式が得られる．

補題 2.1 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(m,n;\mathbb{C})$, $D \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ O & D \end{pmatrix} = \det A \cdot \det D$$

が成り立つ.

補題 2.1 に帰着させることで，一般のブロック行列の行列式も計算できる.

定理 2.4 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(m,n;\mathbb{C})$, $C \in M(n,m;\mathbb{C})$, $D \in M(n;\mathbb{C})$ とする．D が正則行列であるとき，

$$\det\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det D \cdot \det(A - BD^{-1}C) \tag{2.6}$$

が成り立つ．また，A が正則行列であるとき，

$$\det\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det A \cdot \det(D - CA^{-1}B) \tag{2.7}$$

が成り立つ.

証明： D^{-1} が存在するとき，

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_m & B \\ O & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A - BD^{-1}C & O \\ D^{-1}C & I_n \end{pmatrix}$$

が成り立つので，補題 2.1 と定理 2.3 (1) から (2.6) が成り立つ．また，A^{-1} が存在するとき，

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & O \\ C & I_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_m & A^{-1}B \\ O & D - CA^{-1}B \end{pmatrix}$$

が成り立つので，補題 2.1 と定理 2.3 (1) より (2.7) が成り立つ. ∎

この応用として，テンソル積の行列式を求めよう.

命題 2.5 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det(A \otimes B) = (\det A)^n (\det B)^m.$$

証明: (2.2) より，$A \otimes B = (A \otimes I_n)(I_m \otimes B)$ が成り立つ．$I_m \otimes B = \overbrace{B \oplus \cdots \oplus B}^{m\text{ 個}}$ である．また，例題 2.1 での考察から，$A \otimes I_n$ の列を適当に交換し，対応する行を交換すると $I_n \otimes A = \overbrace{A \oplus \cdots \oplus A}^{n\text{ 個}}$ となるので，定理 2.3，補題 2.1 より，

$$\begin{aligned}\det(A \otimes B) &= \det(A \otimes I_n)\det(I_m \otimes B) \\ &= \det(I_n \otimes A)\det(I_m \otimes B) = (\det A)^n (\det B)^m\end{aligned}$$

となる. ∎

最後に，物理学や数学でよく現れるファンデルモンド行列式を求めよう．

定義 2.10 a_1, a_2, $\ldots$, $a_{n+1} \in \mathbb{C}$ に対して，$(n+1)$ 次正方行列

$$V(a_1, a_2, \ldots, a_{n+1}) = \begin{pmatrix} 1 & a_1 & a_1^2 & \ldots & a_1^n \\ 1 & a_2 & a_2^2 & \ldots & a_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & a_{n+1} & a_{n+1}^2 & \ldots & a_{n+1}^n \end{pmatrix}$$

をファンデルモンド行列，その行列式をファンデルモンド行列式という．

まず $n=2$ の場合を求めよう．a_3 を x で置き換えると，見通しがよくなる：

$$V(a_1, a_2, x) = \begin{pmatrix} 1 & a_1 & a_1^2 \\ 1 & a_2 & a_2^2 \\ 1 & x & x^2 \end{pmatrix}.$$

$\det V(a_1, a_2, x)$ は x の 2 次多項式であり，定理 2.3 (3) より，$x = a_1$, a_2 のとき 0 となるので

$$\det V(a_1, a_2, x) = c(x - a_1)(x - a_2)$$

と表される．c は x^2 の係数であり，$\det V(a_1, a_2, x)$ を最下行でラプラス展開すると，$(3,3)$ 行列要素 x^2 の係数は

$$c = \det \begin{pmatrix} 1 & a_1 \\ 1 & a_2 \end{pmatrix} = a_2 - a_1$$

である．したがって，x を a_3 にもどすことで

$$\det V(a_1, a_2, a_3) = (a_2 - a_1)(a_3 - a_1)(a_3 - a_2) = \prod_{1 \le j < i \le 3} (a_i - a_j)$$

が得られた[3]．

次に，数学的帰納法を用いて一般の n について同様の式を証明しよう．

---

3) $\prod_{j=1}^{n} a_j := a_1 a_2 \cdots a_n.$

$$\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n) = \prod_{1 \leq j < i \leq n} (a_i - a_j)$$

が成り立つと仮定する．このとき，$V(a_1, a_2, \ldots, a_n, a_{n+1})$ を求める．a_{n+1} を x に置き換えて $\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n, x)$ を考えると，これは x の n 次多項式であり，定理 2.3 (3) より，$x = a_1,\ a_2,\ \ldots,\ a_n$ のとき 0 となるので

$$\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n, x) = c(x - a_1)(x - a_2) \cdots (x - a_n)$$

と表される．c は x^n の係数であり，$\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n, x)$ を最下行でラプラス展開すると $(n+1, n+1)$ 行列要素 x^n の係数は $\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n)$ にほかならないので，帰納法の仮定から

$$\det V(a_1, a_2, \ldots, a_n, x) = \prod_{1 \leq j < i \leq n} (a_i - a_j) \prod_{1 \leq k \leq n} (x - a_k)$$

が得られる．x を a_{n+1} にもどすことで，次の命題が証明された．

命題 2.6 ファンデルモンド行列式 $\det V(a_1, a_2, \ldots, a_{n+1})$ に対して，

$$\det V(a_1, a_2, \ldots, a_{n+1}) = \prod_{1 \leq j < i \leq n+1} (a_i - a_j)$$

が成り立つ．

2-4 置換と符号の補足

本節では，置換と符号と深く関連する転倒数，差積，完全反対称テンソルについて解説する．

2-4-1 転倒数

数列 1, 4, 3, 2 を考えよう．この列は 4 が 2 と 3 の前に，3 が 2 の前にきている．すなわち，数の大小の転倒が 3 回起こっている．このとき，この列の「転倒数」を 3 と定義する．同様に，3, 4, 1, 2 は 3 と 1, 2 が，4 と 1, 2 がそれぞれ転倒しており，転倒数は 4 となる．1, 2, 3, 4 を並べ替えた数列で転倒数が最大のものは 4, 3, 2, 1 であり，その転倒数は 6 である．

定義 2.11 n 次の置換 σ に対して，$i < j$ かつ $\sigma(i) > \sigma(j)$ であるとき，

$\sigma(i)$ と $\sigma(j)$ は転倒しているという．数列 $\sigma(1), \sigma(2), \ldots, \sigma(n)$ のなかで転倒している対 (i,j) の総数を転倒数といい，$E(\sigma)$ で表す．

場当たり的な方法で置換の互換の積による表示を得るのはやさしくはないが，例 2.5 と比較すると，転倒している対をみつけることで，置換の互換の積による表示を 1 つ得ることができる．実際，転倒している対があれば，その転倒が解消されるように隣どうしの数の入れ替えを繰り返せばよい．これを一般的に行うことで，次の命題が得られた．

命題 2.7　$\sigma \in S_n$ を置換とする．符号 $\mathrm{sgn}(\sigma)$ と転倒数 $E(\sigma)$ の間には

$$\mathrm{sgn}(\sigma) = (-1)^{E(\sigma)}$$

の関係が成り立つ．

問 2.7　$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 1 & 6 & 5 & 2 \end{pmatrix}$ の符号 $\mathrm{sgn}(\sigma)$ と転倒数 $E(\sigma)$ をそれぞれ求めよ．

転倒数の他の応用として，q-類似との関係を考えよう．q-類似は量子力学をはじめ物理学とのかかわりが深い重要な数学である．

定義 2.12　自然数 n と複素数 q $(\neq 1)$ に対して，自然数 n の **q-類似**を

$$[n]_q := 1 + q + \cdots + q^{n-1} = \sum_{j=0}^{n-1} q^j = \frac{1-q^n}{1-q}$$

で定義する．また，$[n]_q$ の **q-階乗**を

$$[n]_q! := [n]_q[n-1]_q \cdots [1]_q = \frac{1-q^n}{1-q}\frac{1-q^{n-1}}{1-q} \cdots \frac{1-q}{1-q} = \prod_{j=1}^{n} \frac{1-q^j}{1-q}$$

で定義する．

問 2.8　$\lim\limits_{q\to 1}[n]_q = n$ を示せ．

$[n]_q$ は q の $(n-1)$ 次多項式であるから $[n]_q!$ も q の多項式であり，その次数は $\sum\limits_{j=1}^{n}(j-1) = n(n-1)/2$ である．その q^k の係数を求めよう．そのた

め，転倒数の母関数をつくる．数列 $\sigma(1), \sigma(2), \ldots, \sigma(n)$ の最初の数 $\sigma(1)$ をとり，その右側にある数で $\sigma(1)$ よりも小さな数の個数を s_1 とする．次に，$\sigma(2)$ よりも右側にあり $\sigma(2)$ よりも小さな数の個数を s_2 とする．同様にして，s_n まで定義する．$s_n = 0$ である．このとき，σ の転倒数は

$$E(\sigma) = \sum_{k=1}^{n} s_k$$

と表される．そこで転倒数の母関数 $\sum_{\sigma \in S_n} q^{E(\sigma)}$ を計算すると，

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma \in S_n} q^{E(\sigma)} &= \sum_{s_1=0}^{n-1} \sum_{s_2=0}^{n-2} \cdots \sum_{s_n=0}^{0} q^{s_1+s_2+\cdots+s_n} \\
&= \sum_{s_1=0}^{n-1} q^{s_1} \sum_{s_2=0}^{n-2} q^{s_2} \cdots \sum_{s_n=0}^{0} q^{s_n} \\
&= [n]_q [n-1]_q \cdots [1]_q \\
&= [n]_q!
\end{aligned}$$

となる．母関数の q^k の係数は転倒数が k となる置換 $\sigma \in S_n$ の個数であるので，次の命題が得られた．

命題 2.8　q-階乗 $[n]_q!$ の q^k $(k = 1, 2, \ldots, n(n-1)/2)$ の係数は，$E(\sigma) = k$ である置換 $\sigma \in S_n$ の個数に等しい．

2-4-2　符号と差積

転倒数は具体的な計算はやさしいが，一般的な表示を得ることは困難である．そこで，置換 $\sigma \in S_n$ の符号 $\mathrm{sgn}(\sigma)$ を σ の各項のみを用いて表示した次の公式は有用である．

命題 2.9　$\sigma \in S_n$ を置換とする．このとき，

$$\mathrm{sgn}(\sigma) = \prod_{n \geq i > j \geq 1} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j} = \prod_{j=1}^{n-1} \prod_{i=j+1}^{n} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j} \tag{2.8}$$

が成り立つ．この中央の式や右辺の式を差積とよぶことにする．

まずは例を計算してみよう．

例 2.9　$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ に対して，(2.8) の中央の式を求めると

$$\begin{aligned}
&\prod_{4 \geq i > j \geq 1} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j} \\
&= \frac{\sigma(2) - \sigma(1)}{2 - 1} \frac{\sigma(3) - \sigma(1)}{3 - 1} \frac{\sigma(4) - \sigma(1)}{4 - 1} \frac{\sigma(3) - \sigma(2)}{3 - 2} \frac{\sigma(4) - \sigma(2)}{4 - 2} \frac{\sigma(4) - \sigma(3)}{4 - 3} \\
&= \frac{4 - 3}{2 - 1} \frac{1 - 3}{3 - 1} \frac{2 - 3}{4 - 1} \frac{1 - 4}{3 - 2} \frac{2 - 4}{4 - 2} \frac{2 - 1}{4 - 3} \\
&= (-1)^4 = 1
\end{aligned}$$

となる．分母と分子の絶対値は同じであり，分子から (-1) が σ の転倒数 $E(\sigma) = 4$ 回だけ現れていることがわかる．

命題 2.9 の証明：　σ の転倒数 $E(\sigma)$ は $k > \ell$, $\sigma(k) < \sigma(\ell)$ を満たす (k, ℓ) の対の個数であるから，

$$\begin{aligned}
\prod_{n \geq i > j \geq 1} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j} &= \prod_{\substack{n \geq k > \ell \geq 1 \\ \sigma(k) < \sigma(\ell)}} \frac{\sigma(k) - \sigma(\ell)}{k - \ell} \prod_{\substack{n \geq i > j \geq 1 \\ \sigma(i) > \sigma(j)}} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j} \\
&= (-1)^{E(\sigma)} \prod_{\substack{n \geq k > \ell \geq 1 \\ \sigma(k) < \sigma(\ell)}} \frac{\sigma(\ell) - \sigma(k)}{k - \ell} \prod_{\substack{n \geq i > j \geq 1 \\ \sigma(i) > \sigma(j)}} \frac{\sigma(i) - \sigma(j)}{i - j}
\end{aligned}$$

となる．分母の因子 $i - j$, $k - \ell$ も分子の因子 $\sigma(i) - \sigma(j)$, $\sigma(\ell) - \sigma(k)$ もすべて正であり，$\prod_{n \geq i > j \geq 1} (i - j) = \prod_{n \geq i > j \geq 1} |\sigma(i) - \sigma(j)|$ が成り立つので，最後の式は約分されて $(-1)^{E(\sigma)}$ に等しい．よって，命題 2.7 により，(2.8) が得られる．∎

2-4-3　完全反対称テンソルとベクトル積

置換の符号をより精密化した完全反対称テンソルは，特に 3 次の場合にベクトル解析で有用である．

定義 2.13　$1, 2, \ldots, n$ を重複も許して並べた数列 $j_1, j_2, \ldots, j_n$ に対して，完全反対称テンソル $\epsilon_{j_1 j_2 \cdots j_n}$ を

$$\epsilon_{j_1 j_2 \cdots j_n} := \begin{cases} +1 & ((j_1, j_2, \ldots, j_n) \text{ が } (1, 2, \ldots, n) \text{ の偶置換}), \\ -1 & ((j_1, j_2, \ldots, j_n) \text{ が } (1, 2, \ldots, n) \text{ の奇置換}), \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \tag{2.9}$$

で定義する．

$(j_1, j_2, \ldots, j_n)$ が重複なく n 次の置換であるとき，完全反対称テンソルはその置換の符号に等しい．それ以外，すなわち同じ添え字が 2 回以上現れる場合は，$(j_1, j_2, \ldots, j_n)$ は置換には対応していないが完全反対称テンソルの値は 0 であり，(2.9) は (2.8) の一般化になっていることがわかる．

$n = 3$ のときを考えよう．まず (2.8) より，

$$\epsilon_{j_1 j_2 j_3} = \frac{(j_2 - j_1)(j_3 - j_1)(j_3 - j_2)}{(2-1)(3-1)(3-2)} = \frac{1}{2}(j_2 - j_1)(j_3 - j_1)(j_3 - j_2)$$

であるので，

$$\sum_{i=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{i\ell m} = \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{3}(j-i)(k-i)(k-j)(\ell-i)(m-i)(m-\ell)$$

となる．この右辺は j と ℓ および k と m の同時交換について対称であり，j と m および k と ℓ の同時交換について反対称である．また，左辺は j と k の交換について反対称であり，ℓ と m の交換についても反対称である．よって，この式は $\delta_{j\ell}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{k\ell}$ に比例することがわかる．ただし $\delta_{j\ell}$ などはクロネッカーのデルタ (1.5) である．$j = \ell = 2, k = m = 3$ を代入すると，その比例定数は 1 であることがわかる．したがって，次が得られた．

命題 2.10 $n = 3$ の完全反対称テンソルについて，次が成り立つ：

$$\sum_{i=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{i\ell m} = \delta_{j\ell}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{k\ell}, \tag{2.10}$$

$$\sum_{i,j=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{ijm} = 2\delta_{km}. \tag{2.11}$$

(2.11) は，(2.10) において j について和をとることで得られる：

$$\sum_{i,j=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{ijm} = \sum_{j=1}^{3}(\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kj}) = 3\delta_{km} - \delta_{km} = 2\delta_{km}.$$

(2.10), (2.11) のベクトル解析への応用を紹介しよう．

2 つの 3 次元ベクトル $\vec{A}, \vec{B} \in \mathbb{R}^3$ のベクトル積 $\vec{A} \times \vec{B} \in \mathbb{R}^3$ の i 成分 $(i = 1, 2, 3)$ は完全反対称テンソルを用いて

$$(\vec{A}\times\vec{B})_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} A_j B_k$$

と表すことができる．ただし，$x \longleftrightarrow 1$, $y \longleftrightarrow 2$, $z \longleftrightarrow 3$ という対応関係を用いた．そこで，3 重ベクトル積 $\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C})$ を整理しよう．その i 成分 $(i=1,2,3)$ は

$$\begin{aligned}
(\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C}))_i &= \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} A_j (\vec{B}\times\vec{C})_k \\
&= \sum_{j,k,\ell,m=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{k\ell m} A_j B_\ell C_m \\
&= \sum_{j,\ell,m=1}^{3} (\delta_{i\ell}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{j\ell}) A_j B_\ell C_m \\
&= \sum_{j=1}^{3} A_j B_i C_j - \sum_{j=1}^{3} A_j B_j C_i \\
&= (\vec{A}\cdot\vec{C})B_i - (\vec{A}\cdot\vec{B})C_i
\end{aligned}$$

となる．ただし，$\cdot$ は 3 次元ベクトルの内積を表す．このベクトル表示は

$$\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C}) = (\vec{A}\cdot\vec{C})\vec{B} - (\vec{A}\cdot\vec{B})\vec{C}$$

となる．

問 2.9 $(\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}$ を整理せよ．

次に，微分演算子を含む場合を考える．$f(x,y,z)$ をスカラー場，$\vec{A}(x,y,z)$ を 3 次元ベクトル場とする．勾配，発散，回転演算子は

$$\begin{aligned}
\text{grad } f &:= \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right), \\
\text{div } \vec{A} &:= \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}, \\
\text{rot } \vec{A} &:= \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)
\end{aligned}$$

で定義される．ナブラ演算子を

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$$

で定義すると，$\mathrm{grad}\, f = \nabla f$, $\mathrm{div}\,\vec{A} = \nabla \cdot \vec{A}$, $\mathrm{rot}\,\vec{A} = \nabla \times \vec{A}$ と書かれる．回転演算子は，完全反対称テンソルを用いて

$$(\mathrm{rot}\ \vec{A})_i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \partial_j A_k$$

と表すことができる．ただし，$\partial_1 = \partial/\partial x$, $\partial_2 = \partial/\partial y$, $\partial_3 = \partial/\partial z$ を表す．$\mathrm{rot}(\mathrm{rot}\ \vec{A})$ を整理しよう．その i 成分 $(i = 1, 2, 3)$ は

$$\begin{aligned}
(\mathrm{rot}(\mathrm{rot}\ \vec{A}))_i &= \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} \partial_j (\mathrm{rot}\ \vec{A})_k \\
&= \sum_{j,k,\ell,m=1}^{3} \epsilon_{ijk}\epsilon_{k\ell m} \partial_j \partial_\ell A_m \\
&= \sum_{j,\ell,m=1}^{3} (\delta_{i\ell}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{j\ell}) \partial_j \partial_\ell A_m \\
&= \sum_{j=1}^{3} \partial_j \partial_i A_j - \sum_{j=1}^{3} \partial_j \partial_j A_i \\
&= \partial_i (\mathrm{div}\ \vec{A}) - \triangle A_i
\end{aligned}$$

となる．ただし，

$$\triangle = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

はラプラス演算子を表す．このベクトル表示は

$$\mathrm{rot}(\mathrm{rot}\ \vec{A}) = \mathrm{grad}(\mathrm{div}\ \vec{A}) - \triangle \vec{A}$$

となる．

問 2.10 $\vec{A}$, $\vec{B}$ を 3 次元ベクトル場とするとき，次の等式を示せ．

(1) $\mathrm{div}(\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot \mathrm{rot}\ \vec{A} - \vec{A} \cdot \mathrm{rot}\ \vec{B}$

(2) $\mathrm{rot}(\vec{A} \times \vec{B}) = (\vec{B} \cdot \nabla)\vec{A} - (\vec{A} \cdot \nabla)\vec{B} + \vec{A}(\mathrm{div}\ \vec{B}) - \vec{B}(\mathrm{div}\ \vec{A})$

3. 行列の関数

3-1 行列値関数とは

行列要素が実変数 t の関数である行列 $A(t)$ を行列値関数という[1]．$A(t) \in M(m,n;\mathbb{C})$ と略記する．この微分 $A'(t)$ は行列要素ごとの微分と定義する．例えば，

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}, \quad A'(t) = \begin{pmatrix} -\sin t & -\cos t \\ \cos t & -\sin t \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

である．関数の微分の定義にまでもどると極限が現れるが，これは行列要素ごとに極限をとると思ってよい．

オイラーの公式 $e^{it} = \cos t + i \sin t$ と指数関数のマクローリン展開

$$e^t = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \tag{3.2}$$

から，(3.1) の $A(t)$ の各行列要素に現れる三角関数をマクローリン展開すると

$$A(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \begin{pmatrix} \frac{1+(-1)^k}{2} i^k & -\frac{1-(-1)^k}{2} i^{k-1} \\ \frac{1-(-1)^k}{2} i^{k-1} & \frac{1+(-1)^k}{2} i^k \end{pmatrix}$$

となる．ここで，

$$\begin{pmatrix} \frac{1+(-1)^k}{2} i^k & -\frac{1-(-1)^k}{2} i^{k-1} \\ \frac{1-(-1)^k}{2} i^{k-1} & \frac{1+(-1)^k}{2} i^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^k \quad (k = 0, 1, 2, \ldots)$$

1) 正確には，$\mathbb{R}$ から $M(m,n;\mathbb{C})$ への写像のことを行列値関数という．

が成り立つので，$-i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ とおいて (3.2) と比較すると，形式的には $A(t) = e^{-it\sigma_y}$ と表される (7-3 節参照)．これを行列の指数関数という．

3-2 行列値関数の微分

行列値関数の微分は各行列要素の微分を行えばよいが，行列の積は一般に可換ではないので，関数が複雑になると計算に注意が必要である．本書では，行列値関数の行列要素は微分可能な関数であるとする．

命題 3.1 (1) $A(t),\ B(t) \in M(m,n;\mathbb{C}),\ c \in \mathbb{C}$ に対して，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}[A(t)+B(t)] = A'(t)+B'(t), \quad \frac{d}{dt}[cA(t)] = cA'(t).$$

(2) $A(t) \in M(m,n;\mathbb{C}),\ B(t) \in M(n,p;\mathbb{C})$ に対して，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}[A(t)B(t)] = A'(t)B(t) + A(t)B'(t).$$

(3) $A(t) \in M(n;\mathbb{C})$ が $\det A(t) \neq 0$ を満たすとき，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}[A(t)^{-1}] = -A(t)^{-1}A'(t)A(t)^{-1}.$$

証明： (1) は省略する．
(2) $A(t)B(t)$ の (i,j) 行列要素を微分すると，積の微分法より

$$\begin{aligned}(A(t)B(t))'_{ij} = \left(\sum_{k=1}^{n} A(t)_{ik}B(t)_{kj}\right)' &= \sum_{k=1}^{n} A(t)'_{ik}B(t)_{kj} + \sum_{k=1}^{n} A(t)_{ik}B(t)'_{kj} \\ &= (A(t)'B(t) + A(t)B(t)')_{ij}\end{aligned}$$

となる．

(3) $\det A(t) \neq 0$ なので，$A(t)$ は各 t ごとに逆行列をもち，$A(t)^{-1}$ は再び行列値関数となる．$A(t)A(t)^{-1} = I_n$ の両辺を t で微分すると，(2) より

$$A'(t)A(t)^{-1} + A(t)\frac{d}{dt}[A(t)^{-1}] = O_n$$

となる．両辺の左から $A(t)^{-1}$ をかけると

$$A(t)^{-1}A'(t)A(t)^{-1} + \frac{d}{dt}[A(t)^{-1}] = O_n$$

が得られる． ∎

3-3　行列式の微分

正方行列値関数 $A(t) \in M(n;\mathbb{C})$ の行列式 $\det A(t)$ は t についての関数となる．その微分を計算しよう．

まず，$n=2$ のときを考える．積の微分法より，

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\det A(t) &= \frac{d}{dt}\left[A_{11}(t)A_{22}(t) - A_{12}(t)A_{21}(t)\right] \\ &= A'_{11}(t)A_{22}(t) + A_{11}(t)A'_{22}(t) - A'_{12}(t)A_{21}(t) - A_{12}(t)A'_{21}(t)\end{aligned}$$

となる．各行列要素の微分は 1 回だけ現れていることに注意しよう．これは

$$\frac{d}{dt}\det A(t) = \begin{vmatrix} A'_{11}(t) & A'_{12}(t) \\ A_{21}(t) & A_{22}(t) \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} A_{11}(t) & A_{12}(t) \\ A'_{21}(t) & A'_{22}(t) \end{vmatrix}$$

と変形すれば，各行を微分した行列式の和となることがわかる．また，

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\det A(t) \\ &\quad = A_{22}(t)A'_{11}(t) + \left[-A_{21}(t)\right]A'_{12}(t) + \left[-A_{12}(t)\right]A'_{21}(t) + A_{11}(t)A'_{22}(t)\end{aligned}$$

と変形すれば，(i,j) 行列要素の微分 $A'_{ij}(t)$ には (i,j) 余因子 $\widehat{A}^{ij}(t)$ がかけられていることがわかる．

この考察をもとに，一般の場合を考える．

命題 3.2　$A(t) \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}\det A(t) = \begin{vmatrix} A'_{11}(t) & \cdots & A'_{1n}(t) \\ A_{21}(t) & \cdots & A_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{n1}(t) & \cdots & A_{nn}(t) \end{vmatrix} + \cdots + \begin{vmatrix} A_{11}(t) & \cdots & A_{1n}(t) \\ A_{21}(t) & \cdots & A_{2n}(t) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A'_{n1}(t) & \cdots & A'_{nn}(t) \end{vmatrix}, \tag{3.3}$$

$$\frac{d}{dt}\det A(t) = \sum_{i,j=1}^{n} \widehat{A}^{ij}(t)A'_{ij}(t). \tag{3.4}$$

また，$A(t) \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ であるとき，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}\det A(t) = \det A(t) \cdot \mathrm{tr}\left(A(t)^{-1}A'(t)\right). \tag{3.5}$$

証明： 行列式の定義

$$\det A(t) = \sum_{\sigma \in S_n} \mathrm{sgn}(\sigma) A_{1\sigma(1)}(t) \cdots A_{n\sigma(n)}(t)$$

の両辺を t で微分すると，積の微分法より (3.3) が得られる．これをラプラス展開すれば (3.4) が得られる．または次のようにしてもよい．i 行目に関するラプラス展開

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \widehat{A}^{ij}$$

において，余因子 $\widehat{A}^{ij}$ の中に A_{ij} は含まれないことを用いると，合成関数の微分より

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial \det A}{\partial A_{ij}} A'_{ij}(t) = \sum_{i,j=1}^{n} \widehat{A}^{ij}(t) A'_{ij}(t)$$

が得られる．

また，$\det A(t) \neq 0$ のとき，$A(t)$ の逆行列 $A(t)^{-1}$ が存在し，その (i,j) 行列要素は $(A(t)^{-1})_{ij} = \widehat{A}^{ji}(t) / \det A(t)$ なので，(3.4) をさらに変形して

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \det A(t) &= \sum_{i,j=1}^{n} \det A(t) (A(t)^{-1})_{ji} A'_{ij}(t) \\ &= \det A(t) \sum_{j=1}^{n} (A(t)^{-1} A'(t))_{jj} \\ &= \det A(t) \cdot \mathrm{tr}\,(A(t)^{-1} A'(t)) \end{aligned}$$

となる． ∎

3-4　行列の指数関数

3-4-1　行列の指数関数とその微分

3-1 節でみたように，指数関数のマクローリン展開を利用して行列の指数関数を定義しよう．これは物理学では量子力学における時間発展を表し，数学では線形微分方程式の基本解になるなど，物理学，数学をとおしてさまざまな場面で重要な役割を果たす．

定義 3.1　正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，A の指数関数を

$$e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = I + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \frac{A^4}{4!} + \cdots \tag{3.6}$$

で定義する．ただし，$A^0 = I$ とする．零行列 O に対しては，$e^O = I$ と解釈する．数の場合と同じように，e^A を $\exp A$ と表すこともある．

例 3.1 $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ に対して，$A^k = \begin{pmatrix} 2^k & 0 \\ 0 & (-1)^k \end{pmatrix}$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ であるので，

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \begin{pmatrix} 2^k & 0 \\ 0 & (-1)^k \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{k!} & 0 \\ 0 & \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^2 & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}$$

となる．一般の正方行列 A の指数関数の計算については，A の対角化やスペクトル分解を利用するのがよく，6, 7 章で扱う．

行列の指数関数の基本的な性質を証明しよう．

命題 3.3 (1) $A, B \in M(n; \mathbb{C})$ が可換，すなわち $AB = BA$ であるとき，次が成り立つ：

$$e^A e^B = e^{A+B}.$$

(2) $A \in M(n; \mathbb{C})$ とする．このとき，e^A は正則行列であり，次が成り立つ：

$$(e^A)^{-1} = e^{-A}.$$

(3) $A \in M(n; \mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$(e^A)^\dagger = e^{A^\dagger}.$$

(4) $A \in M(n; \mathbb{C})$, $B \in \mathrm{GL}(n; \mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$B^{-1} e^A B = e^{B^{-1}AB}.$$

証明： (1) 指数関数の定義 (3.6) から

$$e^A e^B = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A^j}{j!} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B^k}{k!} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\sum_{j+k=m} \frac{A^j B^k}{j!k!} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\sum_{j+k=m} \frac{m!}{j!k!} A^j B^k \right)$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} A^{m-k} B^k = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} (A+B)^m = e^{A+B}$$

となる．ただし，$\binom{m}{k}$ は 2 項係数であり，最後から 2 番目の等号で 2 項定理を用いた．

(2) (1) において，$B = -A$ とすればよい. ∎

問 3.1 指数関数の定義 (3.6) を用いて，命題 3.3 (3), (4) を示せ.

行列の指数関数のなかでも，t によらない定数行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$t \in \mathbb{R}$ の関数である e^{tA} が応用上特に重要である.

命題 3.4 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}e^{tA} = Ae^{tA} = e^{tA}A.$$

証明： 指数関数の定義 (3.6) を項別微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}e^{tA} &= \frac{d}{dt}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{t^kA^k}{k!}\\ &= \sum_{k=1}^{\infty}(t^k)'\frac{A^k}{k!} = \sum_{k=1}^{\infty}kt^{k-1}\frac{A^k}{k!} = A\sum_{k=1}^{\infty}t^{k-1}\frac{A^{k-1}}{(k-1)!} = Ae^{tA}\end{aligned}$$

となる．$AA^k = A^kA$ であるので．右辺は $e^{tA}A$ と表すこともできる. ∎

この応用として，次の重要な公式が得られる.

定理 3.1 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det\left(e^{tA}\right) = e^{t\,(\mathrm{tr}\,A)}. \tag{3.7}$$

証明： $f(t) := \det\left(e^{tA}\right)$, $g(t) := e^{t\,(\mathrm{tr}\,A)}$ とおく．f, g は実変数複素数値関数である．これらが同じ微分方程式と初期条件を満たすことを示そう．まず,

$$f(0) = \det\left(e^{O}\right) = \det I = 1, \quad g(0) = e^0 = 1$$

である．また，命題 3.2, 3.3 と (2.1) より,

$$\frac{d}{dt}f(t) = \det\left(e^{tA}\right)\mathrm{tr}\,(e^{-tA}Ae^{tA}) = (\mathrm{tr}\,A)f(t)$$

が得られる．一方,

$$\frac{d}{dt}g(t) = (\mathrm{tr}\,A)g(t)$$

である．常微分方程式[2)]の初期値問題の解の一意性から，任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して，$f(t) = g(t)$ が成り立つ. ∎

---

2) より正確には，$\dfrac{dy^i}{dx} = f_i(x; y^1, y^2, \ldots, y^n)$ $(1 \le i \le n)$ で与えられる正規形常微分方程式である.

特に，$t=1$ では $\det e^{A}=e^{\operatorname{tr} A}$ が成り立つ．

一方，tA とは限らない一般の行列値関数 $A(t)$ に対しては

$$\frac{d}{dt}e^{A(t)}=A'(t)e^{A(t)}, \qquad \frac{d}{dt}e^{A(t)}=e^{A(t)}A'(t)$$

などとはならないことに注意しよう．実際，項別微分ができたとしても，$A(t)$ と $A'(t)$ は可換とは限らないので，例えば，

$$\left[A(t)^2\right]'=[A(t)A(t)]'=A'(t)A(t)+A(t)A'(t)$$

は $2A'(t)A(t)$ や $2A(t)A'(t)$ に等しいとは限らない．したがって，

$$\frac{d}{dt}e^{A(t)}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(A(t)^k)'}{k!}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{kA'(t)A(t)^{k-1}}{k!}=A'(t)e^{A(t)}$$

とはならない．$e^{A(t)}$ の微分の計算については，命題 3.5 で述べる．

3-4-2 ベイカー–キャンベル–ハウスドルフの公式 (1)

e^{tA} は基本的な関数であるにもかかわらず，A, $B\in M(n;\mathbb{C})$ が可換でないときに $e^{tA}e^{tB}$ を一つの行列の指数関数 $e^{Z(A,B;t)}$ で表すことは容易ではない．しかし，量子力学のいくつかの分野において，この計算は重要な役割を果たす．これをベイカー–キャンベル–ハウスドルフ (**BCH**) の公式とよぶ．

行列値関数 $Z(A,B;t)$ を t についてマクローリン展開し，

$$Z(A,B;t)=\sum_{k=0}^{\infty}Z_k t^k \tag{3.8}$$

と表す．Z_0, Z_1, Z_2 の計算は比較的容易にできる．まず，$e^{tA}e^{tB}=e^{Z(A,B;t)}$ に $t=0$ を代入することにより，$Z_0=O$ が得られる．

次に，$e^{tA}e^{tB}=e^{Z(A,B;t)}$ の両辺を指数関数の定義 (3.6) から計算する．$\mathcal{O}(t^3)$ で t について 3 次以上の項をまとめたものを表すと，左辺は

$$\left(I+tA+\frac{t^2A^2}{2}+\mathcal{O}(t^3)\right)\left(I+tB+\frac{t^2B^2}{2}+\mathcal{O}(t^3)\right)$$
$$=I+t(A+B)+\frac{t^2}{2}(A^2+2AB+B^2)+\mathcal{O}(t^3)$$

となり，右辺は

$$I + (tZ_1 + t^2 Z_2 + \mathcal{O}(t^3)) + \frac{1}{2}(tZ_1 + t^2 Z_2 + \mathcal{O}(t^3))^2 + \cdots$$
$$= I + tZ_1 + \frac{t^2}{2}(2Z_2 + Z_1^2) + \mathcal{O}(t^3)$$

となる．t, t^2 の係数を比較すると

$$Z_1 = A + B, \quad 2Z_2 + Z_1^2 = A^2 + 2AB + B^2$$

であり，

$$Z_1 = A + B, \quad Z_2 = \frac{1}{2}(AB - BA) = \frac{1}{2}[A, B]$$

が得られる．したがって，ベイカー–キャンベル–ハウスドルフ (BCH) の公式の原型である，次の定理が得られた．

定理 3.2　$A, B \in M(n; \mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$e^{tA}e^{tB} = e^{t(A+B)+t^2[A,B]/2+\mathcal{O}(t^3)}.$$

原理的にはこの方法で $Z(A, B; t)$ を計算でき，Z_k は交換子を用いて記述されるが，その計算は容易ではない．一般の場合については 3-4-3 項で述べる．

定理 3.2 の重要な応用に，量子力学における経路積分などに広く応用されている，次のリー–トロッターの公式がある．

定理 3.3　$A, B \in M(n; \mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$e^{A+B} = \lim_{N\to\infty}\left(e^{A/N}e^{B/N}\right)^N.$$

証明： 定理 3.2 において，$t = 1/N$ を代入すると

$$e^{A/N}e^{B/N} = e^{(A+B)/N+[A,B]/2N^2+\mathcal{O}(1/N^3)}$$

となる．指数関数が 1 つにまとまったことで，命題 3.3 (1) が使えて，

$$\lim_{N\to\infty}\left(e^{A/N}e^{B/N}\right)^N = \lim_{N\to\infty} e^{(A+B)+[A,B]/2N+\mathcal{O}(1/N^2)} = e^{A+B}$$

が得られる． ∎

3-4-3　ベイカー–キャンベル–ハウスドルフの公式 (2)

$Z(A,B;t)$ の係数行列 Z_k の一般的な計算について説明しよう．後でこの方法を用いることはないので，興味のない読者はこの項をとばしてかまわない．

まず準備として，$X(t) := e^{tA}Be^{-tA}$ の展開を求めよう．t で微分すると

$$\frac{d}{dt}X(t) = e^{tA}ABe^{-tA} - e^{tA}BAe^{-tA} = e^{tA}[A,B]e^{-tA}$$

が得られる．さらに，もう一度 t で微分すると

$$\frac{d^2}{dt^2}X(t) = e^{tA}A[A,B]e^{-tA} - e^{tA}[A,B]Ae^{-tA} = e^{tA}[A,[A,B]]e^{-tA}$$

が得られる．これを繰り返すと

$$\frac{d^k}{dt^k}X(t) = e^{tA}\overbrace{[A,[A,\cdots,[A,[A}^{k\text{ 回}},B]]\cdots]]e^{-tA} \quad (k=1,2,\ldots)$$

が得られる．ここで，交換子を k 回作用させる部分を

$$([A,)^kB := \overbrace{[A,[A,\cdots,[A,[A}^{k\text{ 回}},B]]\cdots]] \quad (k=1,2,\ldots),$$
$$([A,)^0B := B$$

とおくと，$X(t)$ のマクローリン展開から，

$$\begin{aligned} e^{tA}Be^{-tA} &= X(t) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{X^{(k)}(0)}{k!}t^k = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{([A,)^kB}{k!}t^k \\ &= B + t[A,B] + \frac{t^2}{2!}[A,[A,B]] + \frac{t^3}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots \end{aligned} \tag{3.9}$$

が得られる (アダマールの公式)．これは (3.2) から形式的に，

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{([A,)^kB}{k!}t^k = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(t[A,)^k}{k!}B = e^{t[A,}B$$

とみることができ，この記法を用いる．また，$e^{tA}Be^{-tA}$ に行列の指数関数の定義 (3.6) を代入して，t^n の係数を比較すると

$$([A,)^kB = \sum_{m=0}^{k}\binom{k}{m}(-1)^m A^{k-m}BA^m \quad (k=0,1,2,\ldots)$$

であることがわかる．

これを用いて，一般の行列値関数 $Y(t)$ の指数関数 $e^{Y(t)}$ の微分を計算しよう．次は，キャンベル–ポアンカレの公式とよばれている．

命題 3.5 $Y(t) \in M(n;\mathbb{C})$ を行列値関数とする．このとき，次が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}e^{Y(t)} = e^{Y(t)} \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^{k+1}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{(k+1)!}$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{(k+1)!}e^{Y(t)}.$$

証明： 実パラメータ s を指数に導入する．このとき，命題 3.1, 3.4, (3.9) より，

$$\frac{d}{ds}\left[e^{-sY(t)}\frac{d}{dt}e^{sY(t)}\right] = e^{-sY(t)}[-Y(t)]\frac{d}{dt}e^{sY(t)} + e^{-sY(t)}\frac{d}{dt}\left[Y(t)e^{sY(t)}\right]$$
$$= e^{-sY(t)}[-Y(t)]\frac{d}{dt}e^{sY(t)} + e^{-sY(t)}Y'(t)\frac{d}{dt}e^{sY(t)} + e^{-sY(t)}Y(t)\frac{d}{dt}\left[e^{sY(t)}\right]$$
$$= e^{-sY(t)}Y'(t)e^{sY(t)}$$
$$= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{k!}(-s)^k \tag{3.10}$$

が成り立つ．これを $s=0$ から $s=1$ まで積分する．右辺は項別積分すると

$$\left[e^{-sY(t)}\frac{d}{dt}e^{sY(t)}\right]_{s=0}^{s=1} = e^{-Y(t)}\frac{d}{dt}e^{Y(t)} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{(k+1)!}(-1)^{k+1}$$

となる．左から $e^{Y(t)}$ をかけることにより，

$$\frac{d}{dt}e^{Y(t)} = e^{Y(t)}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^{k+1}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{(k+1)!}$$

が得られる．また，(3.10) において

$$e^{-sY(t)}Y'(t)e^{sY(t)} = e^{-Y(t)}\left[e^{(1-s)Y(t)}Y'(t)e^{-(1-s)Y(t)}\right]e^{Y(t)}$$
$$= e^{-Y(t)}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{([Y(t),)^k Y'(t)}{k!}(1-s)^k e^{Y(t)}$$

と変形してから，$s=0$ から $s=1$ まで積分すれば，後半の式が得られる． ∎

$e^{t[A,}B$ と同様に，

$$\frac{e^{[A,}-I}{[A,}B := \sum_{k=0}^{\infty}\frac{([A,)^k B}{(k+1)!}$$

という記法を用いることもある．

では，$e^{tA}e^{tB}=e^{Z(A,B;t)}$ を満たす $Z(A,B;t)$ の一般的な計算について考えよう．この右辺に命題 3.5 を用いると，命題 3.1, 3.3, 3.4 より

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{\infty}\frac{([Z(A,B;t),)^k Z'(A,B;t)}{(k+1)!} &= \left(\frac{d}{dt}e^{Z(A,B;t)}\right)e^{-Z(A,B;t)} \\
&= \left(\frac{d}{dt}\left[e^{tA}e^{tB}\right]\right)\left(e^{tA}e^{tB}\right)^{-1} \\
&= \left(Ae^{tA}e^{tB}+e^{tA}Be^{tB}\right)e^{-tB}e^{-tA} \\
&= A+e^{t[A,}B
\end{aligned} \tag{3.11}$$

となる．この左辺の各項の分子に (3.8) を代入すると，$Z_0=O$ であったので，

$$Z'(A,B;t)=\sum_{k=1}^{\infty}kZ_k t^{k-1}=Z_1+2Z_2t+3Z_3t^2+4Z_4t^3+\mathcal{O}(t^4),$$

$$\begin{aligned}
&[Z(A,B;t),Z'(A,B;t)] \\
&\quad=\sum_{k_1,k_2=1}^{\infty}k_1[Z_{k_2},Z_{k_1}]t^{k_1+k_2-1}=[Z_1,Z_2]t^2+2[Z_1,Z_3]t^3+\mathcal{O}(t^4),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&[Z(A,B;t),[Z(A,B;t),Z'(A,B;t)]] \\
&\quad=\sum_{k_1,k_2,k_3=1}^{\infty}k_1[Z_{k_3},[Z_{k_2},Z_{k_1}]]t^{k_1+k_2+k_3-1}=[Z_1,[Z_1,Z_2]]\,t^3+\mathcal{O}(t^4)
\end{aligned}$$

である．一方，(3.11) の右辺は (3.9) より

$$A+B+[A,B]t+\frac{1}{2}[A,[A,B]]t^2+\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]t^3+\cdots$$

である．例えば，(3.11) の両辺の t^2, t^3 の項を比較すると

$$3Z_3+\frac{1}{2}[Z_1,Z_2]=\frac{1}{2}[A,[A,B]],$$

$$4Z_4+[Z_1,Z_2]+\frac{1}{6}[Z_1,[Z_1,Z_2]]=\frac{1}{6}[A,[A,[A,B]]]$$

となるので，

$$Z_3=\frac{1}{12}\left([A,[A,B]]+[B,[B,A]]\right),\quad Z_4=\frac{1}{24}[[[B,A],A],B]$$

が得られる．

この方法により Z_k をすべて求めることができる．実際，t^m の係数を比較すると

$$(m+1)Z_{m+1} + \sum_{\ell=2}^{m} \frac{1}{\ell!} \sum_{\substack{k_1+k_2+\cdots+k_\ell=m+1 \\ k_1,k_2,\ldots,k_\ell \geq 1}} k_1 [Z_{k_\ell}, [Z_{k_{\ell-1}}, \cdots, [Z_{k_2}, Z_{k_1}] \cdots]]$$

$$= \frac{1}{m!}([A,\,)^m B \tag{3.12}$$

となるので，帰納的に Z_m が定まる．Z_m $(m \geq 2)$ は一般的に

$$Z_m = \frac{1}{m}\left(\widetilde{Z_m}(A,B) + (-1)^{m-1}\widetilde{Z_m}(B,A)\right) \tag{3.13}$$

と表されることが知られている．ただし，

$$\widetilde{Z_m}(A,B) := \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1}}{k} \sum \frac{([A,\,)^{p_1}([B,\,)^{q_1} \cdots ([A,\,)^{p_{k-1}}([B,\,)^{q_{k-1}} A}{p_1! q_1! \cdots p_{k-1}! q_{k-1}!}$$

であり，右辺の 2 つ目の $\sum$ は

$$(p_1+q_1) + \cdots + (p_{k-1}+q_{k-1}) = m-1,$$

$$p_1+q_1 > 0, \quad \ldots, \quad p_{k-1}+q_{k-1} > 0$$

を満たすすべての非負整数 $p_1, q_1, \ldots, p_{k-1}, q_{k-1}$ についての和を表す．

最後に，ベイカー–キャンベル–ハウスドルフの公式を定理にまとめておこう．

定理 3.4 $A,\, B \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\begin{aligned} e^{tA}e^{tB} &= e^{tZ_1+t^2Z_2+t^3Z_3+t^4Z_4+\cdots} \\ &= e^{t(A+B)+t^2[A,B]/2+t^3([A,[A,B]]+[B,[B,A]])/12+t^4[[[B,A],A],B]/24+\cdots}. \end{aligned}$$

ただし，Z_m $(m=1,2,\ldots)$ は (3.12) から帰納的に定まる，または (3.13) により定義される．

量子力学では $[A,B]$ が，例えば $[A,B]=cI_n$ の場合のように，A や B と交換する場合がしばしばある．このとき，BCH 公式は

$$e^{tA}e^{tB} = e^{t(A+B)+t^2[A,B]/2} = e^{t(A+B)}e^{t^2[A,B]/2}$$

と単純な形になる．

4. 正規直交基底

ここからはベクトル空間と行列をあわせて考えることによって，より深いベクトル空間の性質を学ぶ．1-4 節ではベクトル空間の基底を定義したが，そのとり方は無数にある．なかでも直交座標系のように互いに直交した基底が応用上重要であり，本章ではそのような基底の性質と構成方法について学ぶ．

4-1 正規直交基底

定義 4.1 W を $\mathbb{C}^n$ の部分空間とする．W の基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_k\rangle\}$ が正規直交基底であるとは，次の条件を満たすことである：

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij} \quad (1 \leq i, j \leq k). \tag{4.1}$$

正規とは基底ベクトルの絶対値が 1 (単位ベクトル) であることを，直交とは異なる基底ベクトルの内積が 0 であることを意味している．一般の基底と同様に正規直交基底も無数にあり，4-3 節においてその構成方法を学ぶ．標準基底 $\{|e_1^0\rangle, , |e_2^0\rangle, \ldots, |e_n^0\rangle\}$ は $\mathbb{C}^n$ のもっともよく使われる正規直交基底の一つである．

4-2 完全性関係と射影演算子

$W = \mathbb{C}^n$ とし，$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ をその正規直交基底とする．

4-2-1 完全性関係

$\mathbb{C}^n$ の任意のベクトル $|x\rangle \in \mathbb{C}^n$ は

$$|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} c_k |e_k\rangle \tag{4.2}$$

と基底ベクトルで展開される．$|x\rangle$ と各基底ベクトル $|e_j\rangle$ の内積をとると

$$\langle e_j|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} c_k \langle e_j|e_k\rangle = \sum_{k=1}^{n} c_k \delta_{jk} = c_j \quad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

となり，$|x\rangle$ の j 成分は $|x\rangle$ と基底ベクトル $|e_j\rangle$ の内積で表されることがわかる．これを (4.2) に代入すると

$$|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} \langle e_k|x\rangle |e_k\rangle = \sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k|x\rangle = \left(\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k|\right)|x\rangle$$

となる．ベクトル $|x\rangle$ は任意であるから，右辺の $|x\rangle$ の前にある行列は単位行列 I_n でなければならない．したがって，関係式

$$\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k| = I_n \tag{4.3}$$

が得られる．これを完全性関係という．

4-2-2　正規直交基底の変換

$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_n\rangle$ を列ベクトルとする n 次正方行列を U とすると，(4.1) は $U^\dagger U = I_n$ と同値であり，U はユニタリー行列となる．$\mathbb{C}^n$ の正規直交基底を $\{|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, \ldots, |e'_n\rangle\}$ にとり替えよう．これを列ベクトルにもつ n 次ユニタリー行列を U' とする．完全性関係 (4.3) によって

$$|e'_j\rangle = \left(\sum_{k=1}^{n} |e_k\rangle\langle e_k|\right)|e'_j\rangle = \sum_{k=1}^{n} \langle e_k|e'_j\rangle |e_k\rangle \tag{4.4}$$

となる．$\widetilde{U} = (\langle e_k|e'_j\rangle)$ とおくと，$\widetilde{U}$ は n 次のユニタリー行列である．実際，

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{n} \langle e_k|e'_j\rangle(\langle e_\ell|e'_j\rangle)^* &= \sum_{j=1}^{n} \langle e_k|e'_j\rangle\langle e'_j|e_\ell\rangle \\ &= \langle e_k|e_\ell\rangle = \delta_{k\ell} \qquad (k, \ell = 1, 2, \ldots, n)\end{aligned}$$

となり，$\widetilde{U}\widetilde{U}^\dagger = I_n$ が成り立つ．$\widetilde{U}$ は $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ から $\{|e'_1\rangle, \ldots, |e'_n\rangle\}$ への基底の変換行列を表しており，(4.4) は

$$U' = U\widetilde{U}$$

となる．また，$\widetilde{\widetilde{U}} := U\widetilde{U}U^\dagger = U'U^\dagger \in \mathrm{U}(n)$ とおくと，

$$U' = \widetilde{\widetilde{U}}U, \quad |e'_j\rangle = \widetilde{\widetilde{U}}|e_j\rangle \quad (j = 1, 2, \ldots, n)$$

と表すこともできる．このユニタリー変換によって正規直交性を含む内積構造は保たれている．

4-2-3 射影演算子

完全性関係 (4.3) に現れた n 次正方行列

$$P_i := |e_i\rangle\langle e_i| \quad (1 \le i \le n)$$

を $|e_i\rangle$ 方向への射影演算子という．P_i は任意のベクトル $|x\rangle \in \mathbb{C}^n$ を基底ベクトル $|e_i\rangle$ 方向に射影する．実際，$|x\rangle = \sum_{k=1}^{n} c_k|e_k\rangle$ に対して，

$$P_i|x\rangle = |e_i\rangle\langle e_i|x\rangle = c_i|e_i\rangle$$

となる．よって，$|x\rangle$ から $P_i|x\rangle$ を引いたベクトル $(I_n - P_i)|x\rangle$ は $|e_i\rangle$ 方向の成分をもたず，$|e_i\rangle$ と直交する：

$$\langle e_i|(I_n - P_i)|x\rangle = \langle e_i|x\rangle - \langle e_i|e_i\rangle\langle e_i|x\rangle = 0.$$

これらの関係を図示すると，図 4.1 のようになる．

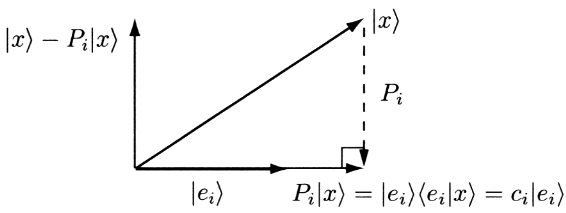


図 4.1 射影演算子 P_i による，$|x\rangle$ の $|e_i\rangle$ 方向への射影と直交ベクトル

例題 4.1 $\theta \in \mathbb{R}$ とする．このとき，

$$|e_1\rangle = (\cos\theta, \sin\theta)^t, \quad |e_2\rangle = (-\sin\theta, \cos\theta)^t$$

は $\mathbb{C}^2$ の正規直交基底であることを示し，完全性関係を満たすことを確かめよ．

解答： $\langle e_1|e_1\rangle = \langle e_2|e_2\rangle = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$，$\langle e_1|e_2\rangle = -\cos\theta\sin\theta + \cos\theta\sin\theta = 0$ となり，$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ は $\mathbb{C}^2$ の正規直交基底である．射影演算子は $P_1 = |e_1\rangle\langle e_1|$, $P_2 = |e_2\rangle\langle e_2|$ であり，次の計算から完全性関係を満たすことがわかる：

$$
\begin{aligned}
|e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| &= P_1 + P_2 \\
&= \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta\sin\theta \\ \cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ -\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix} \\
&= I_2.
\end{aligned}
$$

□

4-3 グラム–シュミットの正規直交化法

4-2 節での考察をもとにして，$\mathbb{C}^n$ の k 次元部分空間 W の基底 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ から W の正規直交基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_k\rangle\}$ を構成するアルゴリズムを考えよう．次の方法はグラム–シュミットの正規直交化法とよばれる．.

(1) 最初の基底ベクトル $|u_1\rangle$ を規格化[1]し，単位ベクトル $|e_1\rangle$ をつくる：

$$|e_1\rangle := \frac{|u_1\rangle}{\||u_1\rangle\|}.$$

(2) 次の基底ベクトル $|u_2\rangle$ から $|e_1\rangle$ 方向の成分を引いたベクトル $|f_2\rangle$ は $|e_1\rangle$ と直交する．ベクトル $|u_2\rangle$ の $|e_1\rangle$ 成分は $\langle e_1|u_2\rangle$ なので，

$$|f_2\rangle := |u_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1|u_2\rangle = (I_n - P_1)\,|u_2\rangle$$

である．$|f_2\rangle$ を規格化し，単位ベクトル $|e_2\rangle$ をつくる：

$$|e_2\rangle := \frac{|f_2\rangle}{\||f_2\rangle\|}.$$

(3) (2) の構成を繰り返す．$2 \le i \le k$ に対して，基底ベクトル $|u_i\rangle$ から $|e_1\rangle, \ldots, |e_{i-1}\rangle$ 方向の成分を引いたベクトル

$$|f_i\rangle := |u_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} |e_j\rangle\langle e_j|u_i\rangle = |u_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1} P_j|u_i\rangle$$

は $|e_1\rangle, \ldots, |e_{i-1}\rangle$ と直交する．実際，$\ell = 1, 2, \ldots, i-1$ に対して，

$$\langle e_\ell|f_i\rangle = \langle e_\ell|u_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1}\langle e_\ell|e_j\rangle\langle e_j|u_i\rangle = \langle e_\ell|u_i\rangle - \sum_{j=1}^{i-1}\delta_{\ell j}\langle e_j|u_i\rangle = 0$$

1) あるベクトルを，その絶対値で割って大きさ 1 の単位ベクトルをつくる操作を，物理学では「規格化」といい，数学では「正規化」という．

となる．$|f_i\rangle$ を規格化し，単位ベクトル $|e_i\rangle$ をつくる：

$$|e_i\rangle := \frac{|f_i\rangle}{\||f_i\rangle\|}.$$

構成法から $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_k\rangle\}$ の各ベクトルは $\{|u_1\rangle, \ldots, |u_k\rangle\}$ の線形結合で表され，W の正規直交基底になっていることがわかる．また，最初の基底ベクトルの順番を変えると，得られる正規直交基底も異なりうることに注意されたい．

例題 4.2 $\mathbb{C}^2$ の基底 $|u_1\rangle = (2, i)^t$, $|u_2\rangle = (1, i)^t$ から，グラム–シュミットの正規直交化法により $\mathbb{C}^2$ の正規直交基底をつくれ．

解答： まず，$|u_1\rangle$ を規格化し

$$|e_1\rangle = \frac{|u_1\rangle}{\||u_1\rangle\|} = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ i \end{pmatrix}$$

とおく．次に，$|u_2\rangle$ から $|e_1\rangle$ 成分を引いて

$$|f_2\rangle = |u_2\rangle - |e_1\rangle\langle e_1|u_2\rangle = |u_2\rangle - \langle e_1|u_2\rangle|e_1\rangle = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -1 \\ 2i \end{pmatrix}$$

とおく．$|f_2\rangle$ の 1/5 は無視して $\begin{pmatrix} -1 \\ 2i \end{pmatrix}$ を規格化しても同じことなので，

$$|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -1 \\ 2i \end{pmatrix}$$

となる．$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ が $\mathbb{C}^2$ の正規直交基底である． □

例題 4.2 の計算を行列表示すると，

$$\begin{pmatrix} |e_1\rangle & |e_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |u_1\rangle & |u_2\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{3}{\sqrt{5}} \\ 0 & \sqrt{5} \end{pmatrix}$$

となり，$|u_1\rangle, |u_2\rangle$ を列ベクトルにもつ行列をユニタリー行列と対角要素が正の実数である上三角行列の積

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ i & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{i}{\sqrt{5}} & \frac{2i}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{3}{\sqrt{5}} \\ 0 & \sqrt{5} \end{pmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{i}{\sqrt{5}} & \frac{2i}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{5} & \frac{3}{\sqrt{5}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}$$

に分解できる．これを **QR** 分解といい，グラム–シュミットの正規直交化法から，任意の正則行列に対して同様の分解が得られる．

問 4.1 $|u_1\rangle = (-1,1,1)^t$, $|u_2\rangle = (1,-1,1)^t$, $|u_3\rangle = (1,1,-1)^t$ とする．

(1) $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ は線形独立であることを示せ

(2) グラム–シュミットの正規直交化法により，$\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ から $\mathbb{C}^3$ の正規直交基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ を構成せよ．

(3) $|u\rangle = (1,1,1)^t$ の基底 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ に関する成分をそれぞれ求めよ．

問 4.2 $\mathbb{C}^3$ のベクトル $|u_1\rangle = (1,1,1)^t$, $|u_2\rangle = (1,1,i)^t$ を考える．$\mathbb{C}^3$ の 2 次元部分空間 $\mathrm{Span}(\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\})$ の正規直交基底を 1 組求めよ．

4-4 射影演算子の補足

$\mathbb{C}^n$ の部分空間 $W\,(\neq \mathbb{C}^n)$ の正規直交基底から完全性関係が得られるか考えてみよう．例として，$\mathbb{C}^3$ の部分空間

$$W = \{|x\rangle \in \mathbb{C}^3 \mid x_1 - ix_2 + x_3 = 0\}$$

を考える．例題 1.2 でその基底の一つ $|u_1\rangle = (1,0,-1)^t$, $|u_2\rangle = (0,1,i)^t$ を求めた．グラム–シュミットの正規直交化法により，W の正規直交基底として

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2i \\ 1 \end{pmatrix}$$

が得られる．そこで $P := |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2|$ を計算してみると

$$\begin{aligned} P &= |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2| \\ &= \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & i & -1 \\ -i & 2 & -i \\ -1 & i & 2 \end{pmatrix} \neq I_3 \end{aligned}$$

であるが，任意の $|x\rangle \in \mathbb{C}^3$ に対して，次が成り立つことがわかる：

$$P|x\rangle \in W, \quad P^2 = P.$$

したがって，行列 P の定める線形演算子 (5-1 節参照) $P\colon \mathbb{C}^3 \longrightarrow \mathbb{C}^3$ は $\mathbb{C}^3$ の元を W に写し，W 上の元は動かさないので，W への射影となっている．

一般に，行列または線形演算子 P が

$$P^2 = P$$

を満たすとき，P を射影演算子という．$\mathbb{C}^n$ の部分空間 W の正規直交基底 $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_k\rangle\}$ に対して，

$$P = |e_1\rangle\langle e_1| + \cdots + |e_k\rangle\langle e_k|$$

は $\mathbb{C}^n$ から W への射影演算子となる．

5. 線形演算子と行列

物理学や数学に現れるほとんどの演算子は，微分演算子をはじめとして線形性を満たしている．その抽象的な扱いは初学者にはやさしくはないが，ベクトル空間の基底を指定するごとに，線形演算子は行列と同一視できる．本章では，抽象的な線形演算子と具体的な行列の対応関係について考える．

5-1 線形演算子

V, W を $K\ (=\mathbb{C}, \mathbb{R})$ 上のベクトル空間とする．

定義 5.1 写像 $F\colon V \to W$ が線形性条件

$$F(c_1\boldsymbol{u} + c_2\boldsymbol{v}) = c_1F(\boldsymbol{u}) + c_2F(\boldsymbol{v}) \quad (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in V,\ c_1, c_2 \in K)$$

を満たすとき，F を線形演算子という．

1-5-1 項で定義した線形関数はこの特別な場合である．

例 5.1 $V = \mathbb{C}^n$, $W = \mathbb{C}^m$, $A \in M(m, n; \mathbb{C})$ とする．写像 $F\colon V \longrightarrow W$ を，任意の $|x\rangle \in V$ に対して $F_A(|x\rangle) := A|x\rangle$ で定義すると，F_A は線形演算子である．実際，

$$\begin{aligned} F_A(c_1|x\rangle + c_2|y\rangle) = A(c_1|x\rangle + c_2|y\rangle) &= c_1A|x\rangle + c_2A|y\rangle \\ &= c_1F_A(|x\rangle) + c_2F_A(|y\rangle) \end{aligned}$$

$(|x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n,\ c_1, c_2 \in \mathbb{C})$ である．F_A を行列 A の定める線形演算子という．

5-2 節で，逆に線形演算子は行列とみなせることを学ぶ．

例 5.2 V を $\mathbb{R}$ 上の無限階微分可能関数全体のなすベクトル空間とする[1]．写像 $D\colon V \longrightarrow V$ を $D(f(x)) := f'(x)$ で定義すると，D は線形演算子である．実際，$f, g \in V$, $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$ に対して，微分の線形性から

$$D(c_1 f(x) + c_2 g(x)) = (c_1 f(x) + c_2 g(x))' \\ = c_1 f'(x) + c_2 g'(x) = c_1 D(f(x)) + c_2 D(g(x))$$

である．D を微分演算子という．

本書では扱わないが，V 上の微分演算子は無限次の行列とみなすことができ，対角化やスペクトル分解を利用して，その性質を理解することができる．

5-2　線形演算子と行列

5-2-1　線形演算子の行列要素

V, W をそれぞれ $\mathbb{C}^n$, $\mathbb{C}^m$ の部分空間とする．線形演算子 $F\colon V \longrightarrow W$ に行列を対応させよう．$\{|e_1\rangle, \ldots, |e_p\rangle\}$ を V の正規直交基底, $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_q\rangle\}$ を W の正規直交基底とする[2]．このとき，V の任意のベクトルは $|v\rangle = \sum_{j=1}^{p} c_j |e_j\rangle$ と展開される (具体的には $c_j = \langle e_j | v\rangle$ である (4-2 節参照))．F の線形性から

$$F|v\rangle = \sum_{j=1}^{p} c_j F|e_j\rangle \in W$$

が得られる[3]．よって，F の作用は V の各基底ベクトル $|e_j\rangle$ に対する F の作用が指定されれば決まる．各 $F|e_j\rangle$ $(j = 1, 2, \ldots, p)$ は W の元なので，

$$F|e_j\rangle = \sum_{k=1}^{q} A_{kj} |f_k\rangle$$

と展開される．係数 $A_{ij} \in \mathbb{C}$ は $\langle f_i|$ との内積をとることで得られる：

---

1)　V は無限次元ベクトル空間となる．n 次元ベクトル空間 P_n (1-5-3 項参照) でもよい．

2)　正規直交基底でない場合には，グラム–シュミットの正規直交化法 (4-3 節参照) によって，いつでも正規直交基底にとり直して議論することができる．

3)　$F(|v\rangle)$ などとすべきだが，すぐ後で述べる行列との関係から $F|v\rangle$ などと略記する．

$$A_{ij} = \langle f_i|F|e_j\rangle \quad (i = 1, 2, \ldots, q,\ j = 1, 2, \ldots, p).$$

したがって，線形演算子 F に $q \times p$ 行列 $A = (A_{ij}) \in M(q, p; \mathbb{C})$ が対応することがわかった．この行列を 5-2 節に限り A_F と表すことにする．

k 次元ベクトル空間は，正規直交基底が与えられているとき，その成分をとり出すことで，内積を保ち $\mathbb{C}^k$ と同一視できる．また，物理学では線形演算子 $F\colon V \longrightarrow W$ はより大きな空間における線形演算子 $\widetilde{F}\colon \mathbb{C}^n \longrightarrow \mathbb{C}^m$ の V への制限であることも多い．したがって，以下本書では，線形演算子を考えるときには主に $V = \mathbb{C}^n$, $W = \mathbb{C}^m$ の場合 (すなわち $p = n$, $q = m$) を議論することにしよう．

例題 5.1 $\mathbb{C}^3$ の部分空間 $W = \{|x\rangle \in \mathbb{C}^3 \mid x_1 - ix_2 + x_3 = 0\}$ (例題 1.2, 4-4 節参照) と，行列 $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & i & 0 \end{pmatrix}$ の定める線形演算子 $F_B\colon \mathbb{C}^3 \longrightarrow W$ (例 5.1 参照) を考える．$\mathbb{C}^3$ の正規直交基底を標準基底 $\{|e_1^0\rangle, |e_2^0\rangle, |e_3^0\rangle\}$，$W$ の正規直交基底を $|f_1\rangle = (1, 0, -1)^t/\sqrt{2}$, $|f_2\rangle = (1, -2i, 1)^t/\sqrt{6}$ とするとき，F_B に対応する 2×3 行列 A_{F_B} を求めよ．また，$\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, |f_3\rangle\}$ を $\mathbb{C}^3$ の正規直交基底とするとき，$F_B\colon \mathbb{C}^3 \longrightarrow \mathbb{C}^3$ に対応する 3×3 行列 $\widetilde{A_{F_B}}$ を求めよ．

解答： $|x\rangle = (x, y, z)^t$ に対し $B|x\rangle = (x_1 + ix_3, x_2 + x_3, -x_1 + ix_2)^t$ は $(x_1 + ix_3) - i(x_2 + x_3) + (-x_1 + ix_2) = 0$ を満たすので，W の元である．F_B に対応する行列の行列要素は

$$\langle f_1|F_B|e_1^0\rangle = \sqrt{2}, \qquad \langle f_1|F_B|e_2^0\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}, \qquad \langle f_1|F_B|e_3^0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}},$$
$$\langle f_2|F_B|e_1^0\rangle = 0, \qquad \langle f_2|F_B|e_2^0\rangle = \frac{3i}{\sqrt{6}}, \qquad \langle f_2|F_B|e_3^0\rangle = \frac{3i}{\sqrt{6}},$$
$$\langle f_3|F_B|e_1^0\rangle = 0, \qquad \langle f_3|F_B|e_2^0\rangle = 0, \qquad \langle f_3|F_B|e_3^0\rangle = 0$$

である．よって，

$$A_{F_B} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{3i}{\sqrt{6}} & \frac{3i}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{A_{F_B}} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{3i}{\sqrt{6}} & \frac{3i}{\sqrt{6}} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

である． □

線形演算子はベクトル空間の基底のとり方には独立に与えられるが，それに対応する行列はベクトル空間の基底を指定するまでは決まらず，また，基底のとり方に応じて異なる．実際，例題 5.1 において，$F_B\colon \mathbb{C}^3 \longrightarrow \mathbb{C}^3$ で $\mathbb{C}^3$ の標準基底を考えたときには $A_{F_B} = B$ となる．

問 5.1 高々 3 次の実係数多項式全体のなすベクトル空間 P_4 を考える．P_4 は 1-5-3 項の対応で $\mathbb{R}^4$ と同一視し，内積も $\mathbb{R}^4$ の内積を用いる．微分演算子 $D\colon P_4 \longrightarrow P_4$ (例 5.2 参照) を考える．$\mathbb{R}^4$ の正規直交基底を標準基底 $\{|e_1^0\rangle, |e_2^0\rangle, |e_3^0\rangle, |e_4^0\rangle\}$ とするとき，D に対応する 4 次正方行列 A_D を求めよ．

5-2-2 基底の変換と行列

基底の変換によって行列要素がどのように変わるか調べよう．変換されるのは基底であり，演算子そのものは変化しないことに注意しよう．$V = \mathbb{C}^n, W = \mathbb{C}^m$ とし，V, W の正規直交基底をそれぞれ $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$, $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_m\rangle\}$ とする．このとき，線形演算子 $F\colon V \longrightarrow W$ に対応する行列 $A_F = (A_{ij})$ の (i,j) 行列要素は

$$A_{ij} = \langle f_i|F|e_j\rangle$$

で定義された．そこで，V, W の正規直交基底をそれぞれ $\{|e'_1\rangle, \ldots, |e'_n\rangle\}$, $\{|f'_1\rangle, \ldots, |f'_m\rangle\}$ にとり替えよう．このとき，線形演算子 F に対応する行列 $A'_F = (A'_{ij})$ の (i,j) 行列要素は，完全性関係 (4.3) によって

$$\begin{aligned} A'_{ij} &= \langle f'_i|F|e'_j\rangle \\ &= \langle f'_i|\sum_{k=1}^{m}|f_k\rangle\langle f_k|F\sum_{\ell=1}^{n}|e_\ell\rangle\langle e_\ell|e'_j\rangle = \sum_{k=1}^{m}\sum_{\ell=1}^{n}\langle f'_i|f_k\rangle A_{k\ell}\langle e_\ell|e'_j\rangle \end{aligned}$$

となる．ここで，$U_1 = (\langle f_k|f'_i\rangle), U_2 = (\langle e_\ell|e'_k\rangle)$ は正規直交基底の変換を表す m, n 次のユニタリー行列である (4-2-2 項参照)．$U_1^\dagger = (\langle f'_i|f_k\rangle)$ なので，

$$A'_F = U_1^\dagger A_F U_2 \tag{5.1}$$

が得られる．

特に $V = W = \mathbb{C}^n$ の場合は，共通の正規直交基底 $|f_i\rangle = |e_i\rangle, |f'_i\rangle = |e'_i\rangle$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ をとるのが自然であり，このとき F に対応する行列と基底の変換の関係は

$$A'_F = U_1^\dagger A_F U_1$$

となる．

最後に，行列の基底による分解について述べる．$V=\mathbb{C}^n$, $W=\mathbb{C}^m$ とし，V, W の正規直交基底をそれぞれ $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$, $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_m\rangle\}$ とする．行列 $A \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，A の定める線形演算子 $F_A\colon V \longrightarrow W$ (例 5.1 参照) を考える．F_A に対応する行列 $A_{F_A} = (A'_{ij})$ の (i,j) 行列要素は

$$A'_{ij} = \langle f_i|F_A|e_j\rangle = \langle f_i|A|e_j\rangle$$

であるので，完全性関係 (4.3) によって

$$A = \sum_{i=1}^{m} |f_i\rangle\langle f_i|A \sum_{j=1}^{n} |e_j\rangle\langle e_j| = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} A'_{ij}|f_i\rangle\langle e_j|$$

が得られる．A は V, W の標準基底に関する F_A の行列表示であり，$A_{F_A} = (A'_{ij})$ は与えられた基底 $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$, $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_m\rangle\}$ に関する行列表示である．各 $|f_i\rangle\langle e_j|$ は $m\times n$ 行列なので，与えられた行列 A の基底による分解が得られた．これは，(5.1) において $\{|e'_1\rangle, \ldots, |e'_n\rangle\}$, $\{|f'_1\rangle, \ldots, |f'_m\rangle\}$ を V, W の標準基底としたものにほかならない．

特に $V = W = \mathbb{C}^n$ の場合は，共通の正規直交基底 $|f_i\rangle = |e_i\rangle$ $(i = 1,2,\ldots,n)$ をとるのが自然であり，このとき $A \in M(n;\mathbb{C})$ は

$$A = \sum_{i,j=1}^{n} A'_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|$$

と分解される．7 章で定義する正規行列に対しては，よい正規直交基底を選ぶと，行列がスペクトル分解という簡明な分解をもつことを 7-2 節で学ぶ．

5-2-3 行列の演算との関係

$U=\mathbb{C}^p$, $V=\mathbb{C}^n$, $W=\mathbb{C}^m$ とし，U, V, W の正規直交基底をそれぞれ $\{|g_1\rangle, \ldots, |g_p\rangle\}$, $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$, $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_m\rangle\}$ とする．

2 つの線形演算子 $G\colon U \longrightarrow V$, $F\colon V \longrightarrow W$ の合成演算子 $F\circ G\colon U \longrightarrow W$ に対応する行列を求めよう．$\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ の完全性関係 (4.3) より

$$\begin{aligned}(A_{F\circ G})_{ik} &= \langle f_i|F\circ G|g_k\rangle \\ &= \langle f_i|F\sum_{j=1}^{n}|e_j\rangle\langle e_j|G|g_k\rangle = \sum_{j=1}^{n}(A_F)_{ij}(A_G)_{jk}\end{aligned}$$

となるので,

$$A_{F\circ G} = A_F A_G$$

が得られる．すなわち，$F \circ G$ に対応する行列は F, G に対応する行列の積である．

定義 5.2　$F\colon V \longrightarrow W$ を線形演算子とする．線形演算子 $G\colon W \longrightarrow V$ が

$$\langle v|G|w\rangle = \langle w|F|v\rangle \quad (|v\rangle \in V,\ |w\rangle \in W)$$

を満たすとき，G を F の**転置演算子**といい，F^t で表す．

転置演算子 F^t に対応する行列を求めよう．

$$(A_{F^t})_{ij} = \langle e_i|F^t|f_j\rangle = \langle f_j|F|e_i\rangle = (A_F)_{ji}$$

となるので,

$$A_{F^t} = (A_F)^t$$

が得られる．すなわち，F^t に対応する行列は F に対応する行列の転置である．

定義 5.3　線形演算子 $F\colon V \longrightarrow V$ が

$$\langle w|F^t|v\rangle = \langle v|F|w\rangle \quad (|v\rangle, |w\rangle \in V)$$

を満たすとき，F を**対称演算子**という．

対称演算子に対応する行列を求めよう．

$$(A_{F^t})_{ij} = \langle e_i|F^t|e_j\rangle = \langle e_j|F|e_i\rangle = (A_F)_{ji}$$

となるので,

$$A_{F^t} = (A_F)^t = A_F$$

が得られる．すなわち，F は対称行列に対応している．

定義 5.4　$F\colon V \longrightarrow W$ を線形演算子とする．線形演算子 $G\colon W \longrightarrow V$ が

$$\langle v|G|w\rangle = (\langle w|F|v\rangle)^* \quad (|v\rangle \in V,\ |w\rangle \in W)$$

を満たすとき，G を F のエルミート共役といい，$F^\dagger$ で表す．

定義 5.5 線形演算子 $F\colon V \longrightarrow V$ が

$$\langle w|F^\dagger|v\rangle = \langle v|F|w\rangle \quad (|v\rangle, |w\rangle \in V)$$

を満たすとき，F をエルミート演算子という．

定義 5.6 線形演算子 $F\colon V \longrightarrow V$ が

$$\langle w|F^\dagger \circ F|v\rangle = \langle w|v\rangle \quad (|v\rangle, |w\rangle \in V)$$

を満たすとき，F をユニタリー演算子という．

問 5.2 エルミート演算子に対応する行列はエルミート行列であり，ユニタリー演算子に対応する行列はユニタリー行列であることを示せ．

正規直交基底の変換はユニタリー演算子であり，V の内積の構造を変えない．逆にユニタリー演算子によって，正規直交基底は正規直交基底に変換され，内積は保たれる (4-2-2 項参照).

数学では基底によらない抽象的な演算子と基底が与えられたときに決まる行列を記号でさえも区別して使うことが多い．一方，物理学では演算子を考えるときにはあらかじめ正規直交基底が決められていることが多い．基底が指定されれば線形演算子には行列が積などの演算との関係も込めて対応しているので，以下本書でも，抽象的な演算子とそれを表す行列を区別せずに用いることにする．

5-3 線形演算子の核と像

$V = \mathbb{C}^n$, $W = \mathbb{C}^m$ とする．V, W のゼロ・ベクトルをそれぞれ $\mathbf{0}_V, \mathbf{0}_W$ で区別する．線形演算子 $A\colon V \longrightarrow W$ を考えよう．線形演算子 A から V, W の重要な部分空間がつくられる．

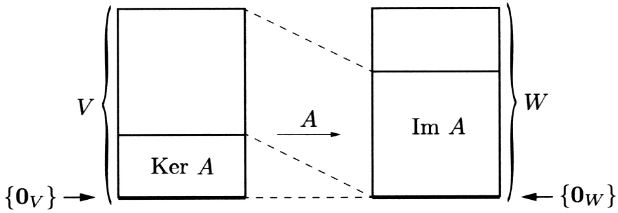


図 5.1 写像 A は V を $\mathrm{Im}\ A \subset W$ に写像し, $\mathrm{Ker}\ A \subset V$ を $\{\mathbf{0}_W\} \subset W$ に写像する. $\mathbf{0}_V$ は $\mathrm{Ker}\ A$ の元である.

定義 5.7 (1) V の部分集合

$$\mathrm{Ker}\, A := \{|v\rangle \in V \mid A|v\rangle = \mathbf{0}_W\}$$

を A の核という. これを $A^{-1}(\mathbf{0}_W)$ と表すこともある.

(2) W の部分集合

$$\mathrm{Im}\, A := \{A|v\rangle \in W \mid |v\rangle \in V\}$$

を A の像という. これを $A(V)$ と表すこともある.

図 5.1 は $\mathrm{Ker}\ A$ と $\mathrm{Im}\ A$ の概念図である.

例 5.3 $V = W = \mathbb{C}^3$ とし, $A = \begin{pmatrix} 1 & -i & 1 \\ i & 1 & i \\ 1 & -i & 1 \end{pmatrix}$ の定める線形演算子 $A\colon V \longrightarrow W$ を考える. このとき, $|v\rangle = (x, y, z)^t \in V = \mathbb{C}^3$ に対して,

$$A|v\rangle = (x - iy + z) \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる. ただし, $w := x - iy + z$ とおいた. $|w_1\rangle = (1, i, 1)^t$ とおくと,

$$\mathrm{Im}\, A = \mathrm{Span}(\{|w_1\rangle\})$$

となる. $\mathrm{Im}\, A$ は $W = \mathbb{C}^3$ の 1 次元部分空間であり, これは $\mathbb{C}$ と同一視される複素直線を表す. また,

$$\dim \mathrm{Im}\, A = \mathrm{rank}\, A = 1$$

が成り立つ．

次に，$A|v\rangle = \mathbf{0}_W$ は

$$(x - iy + z)\begin{pmatrix}1\\ i\\ 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\\ 0\end{pmatrix}$$

であり，$\mathrm{Ker}\,A$ の元を求めることはこの連立方程式の解を求めることである．したがって，

$$\mathrm{Ker}\,A = \{|v\rangle \in V \mid x - iy + z = 0\}$$

となる．$\mathrm{Ker}\,A$ は $|v_1\rangle = (1, 0, -1)^t$, $|v_2\rangle = (0, 1, i)^t$ を基底とする $V = \mathbb{C}^3$ の 2 次元部分空間であり (例題 1.2 参照)，これは $\mathbb{C}^2$ と同一視される複素平面を表す．また，

$$\dim \mathrm{Ker}\,A = 3 - \mathrm{rank}\,A = 2$$

が成り立つ．

この例を一般化しよう．

命題 5.1　$V = \mathbb{C}^n, W = \mathbb{C}^m$ とし，$A\colon V \longrightarrow W$ を線形演算子とする．

(1)　$\mathrm{Ker}\,A$ は V の部分空間である．

(2)　$\mathrm{Im}\,A$ は W の部分空間であり，$\dim \mathrm{Im}\,A = \mathrm{rank}\,A$ が成り立つ．

証明：　(1)　$A\mathbf{0}_V = \mathbf{0}_W$ なので，$\mathbf{0}_V \in \mathrm{Ker}\,A$ である．次に，$|v_1\rangle, |v_2\rangle \in \mathrm{Ker}\,A$ をとると，$A|v_1\rangle = A|v_2\rangle = \mathbf{0}_W$ である．$c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ に対して，A の線形性から

$$A(c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle) = c_1 A|v_1\rangle + c_2 A|v_2\rangle = c_1\mathbf{0}_W + c_2\mathbf{0}_W = \mathbf{0}_W$$

となるので，$c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle \in \mathrm{Ker}\,A$ である．命題 1.1 より，$\mathrm{Ker}\,A$ は V の部分空間である．

(2)　$A\mathbf{0}_V = \mathbf{0}_W$ なので，$\mathbf{0}_W \in \mathrm{Im}\,A$ である．次に，$|w_1\rangle, |w_2\rangle \in \mathrm{Im}\,A$ をとると，$A|v_1\rangle = |w_1\rangle$, $A|v_2\rangle = |w_2\rangle$ を満たす $|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V$ が存在する．$c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ に対して，A の線形性から

$$A(c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle) = c_1 A|v_1\rangle + c_2 A|v_2\rangle = c_1|w_1\rangle + c_2|w_2\rangle$$

となるので，$c_1|w_1\rangle + c_2|w_2\rangle \in \mathrm{Im}\,A$ である．命題 1.1 より，$\mathrm{Im}\,A$ は W の部分空間である．

V, W の正規直交基底をそれぞれの標準基底にとる．このとき，A に対応する行列の列ベクトルを $|w_1\rangle, |w_2\rangle, \ldots, |w_n\rangle$, すなわち $A = \begin{pmatrix}|w_1\rangle & |w_2\rangle & \cdots & |w_n\rangle\end{pmatrix}$ とすると，$A|e_j^0\rangle = |w_j\rangle$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ が成り立つので，任意の $|x\rangle = \sum_{j=1}^{n} x_j|e_j^0\rangle \in V = \mathbb{C}^n$ に対して，

$$A|x\rangle = \sum_{j=1}^{n} x_j|w_j\rangle$$

となる．したがって，$\mathrm{Im}\,A = \mathrm{Span}(\{|w_1\rangle, |w_2\rangle, \ldots, |w_n\rangle\})$ である．定理 2.1 より，$\dim \mathrm{Im}\,A = \mathrm{rank}\,A$ が成り立つ． ∎

例 5.3 によれば，核 $\mathrm{Ker}\,A$ の基底は行の基本操作で，像 $\mathrm{Im}\,A$ の基底は列の基本操作で A を変形することで求めることができる．

最後に，$\mathrm{Ker}\,A$ の次元と $\mathrm{Im}\,A$ の次元の関係を与える次元定理を証明しよう．

定理 5.1 $V = \mathbb{C}^n, W = \mathbb{C}^m$ とし，$A\colon V \longrightarrow W$ を線形演算子とする．このとき，次が成り立つ：

$$\dim \mathrm{Ker}\,A + \dim \mathrm{Im}\,A = \dim V = n. \tag{5.2}$$

証明： $\mathrm{Ker}\,A$ の基底を $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_p\rangle\}$, $\mathrm{Im}\,A$ の基底を $\{|f_1\rangle, \ldots, |f_q\rangle\}$ とする．$p = \dim \mathrm{Ker}\,A$, $q = \dim \mathrm{Im}\,A$ なので，$p + q = n$ を示せばよい．

各 $|f_j\rangle \in \mathrm{Im}\,A$ に対して，$|f_j\rangle = A|v_j\rangle$ を満たす $|v_j\rangle \in V$ をとる．このとき，$S := \{|e_1\rangle, \ldots, |e_p\rangle, |v_1\rangle, \ldots, |v_q\rangle\}$ が V の基底となることを示そう．

まず，任意の $|v\rangle \in V$ に対して，$A|v\rangle \in \mathrm{Im}\,A$ を $A|v\rangle = \sum_{j=1}^{q} c_j|f_j\rangle$ と展開すると，

$$A\left(|v\rangle - \sum_{j=1}^{q} c_j|v_j\rangle\right) = A|v\rangle - \sum_{j=1}^{q} c_j|f_j\rangle = \mathbf{0}_W$$

となるので，$|v\rangle - \sum_{j=1}^{q} c_j|v_j\rangle \in \mathrm{Ker}\,A$ が得られる．これを

$$|v\rangle - \sum_{j=1}^{q} c_j|v_j\rangle = \sum_{k=1}^{p} d_k|e_k\rangle$$

と展開すると，

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{q} c_j|v_j\rangle + \sum_{k=1}^{p} d_k|e_k\rangle$$

が得られる．よって，$V = \mathrm{Span}(S)$ である．

次に，S の線形独立性を示す．方程式

$$\sum_{k=1}^{p} a_k|e_k\rangle + \sum_{j=1}^{q} b_j|v_j\rangle = \mathbf{0}_V$$

を考える．両辺に左から A を作用させると，

$$\mathbf{0}_W = A\left(\sum_{k=1}^{p} a_k|e_k\rangle + \sum_{j=1}^{q} b_j|v_j\rangle\right) = \sum_{j=1}^{q} b_j|f_j\rangle$$

となる．$\{|f_1\rangle, \ldots, |f_q\rangle\}$ は $\mathrm{Im}\,A$ の基底であり，特に線形独立なので，$b_1 = \cdots = b_q = 0$ が得られる．このとき，$\sum_{k=1}^{p} a_k|e_k\rangle = \mathbf{0}_V$ となるが，$\{|e_1\rangle, \ldots, |e_p\rangle\}$ は $\mathrm{Ker}\,A$ の基底であり，特に線形独立なので，$a_1 = \cdots = a_p = 0$ が得られる．よって，S は線形独立である．

したがって，S は V の基底であり，$\dim V = p + q$ が成り立つ．∎

問 5.3 $V = W = \mathbb{C}^3$ とし，$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ の定める線形演算子 $A\colon V \longrightarrow W$ を考える．このとき，$\mathrm{Ker}\,A$ と $\mathrm{Im}\,A$ の基底を求め，(5.2) を確めよ．また，それらの基底から正規直交基底を構成せよ．

6. 固有値と固有ベクトル

例えば，2 次正方行列 $A = \begin{pmatrix} -1 & 6 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$ をベクトル $|u\rangle = (1,1)^t$ に作用させると，$A|u\rangle = (5,3)^t$ となり，$|u\rangle$ とは別の方向を向く．ところが，うまく選んだベクトル $|v\rangle = (2,1)^t$ に作用させると，$A|v\rangle = 2(2,1)^t$ となり，$|v\rangle$ と同じ方向を向く．また，$|w\rangle = (3,1)^t$ に作用させると，$A|w\rangle = (3,1)^t = |w\rangle$ となる．A はそのままではどのような作用になるのかよくわからないが，$|v\rangle, |w\rangle$ を $\mathbb{C}^2$ の基底として眺めてみると，A は $|v\rangle$ 方向には 2 倍の拡大作用，$|w\rangle$ 方向には恒等作用という単純な作用であり，一般のベクトル $|x\rangle$ に対しては，この重ね合わせで A の作用を理解することができる．

このように，作用を単純化する方向やそのときの単純化された作用を求める問題を，行列または線形演算子 A の固有値問題という．本章では，線形演算子 $A\colon V \longrightarrow V$ に対応する正方行列に対して，その固有値問題を議論する．それは，数学的には，A の演算子としての本質を見抜くことであり，物理学的には，例えばシュレディンガー方程式の解でエネルギーが定まった状態を決定することなどに対応する．

6-1 固有値と固有ベクトル

6-1-1 固有値問題

定義 6.1 正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle, \quad |v\rangle \neq \mathbf{0} \tag{6.1}$$

を満たす $\lambda \in \mathbb{C}$ を A の固有値，$|v\rangle \in \mathbb{C}^n$ を固有値 λ に属する固有ベクトルという．A の固有値全体の集合を A のスペクトル集合といい，$\mathrm{Spec}(A)$

で表す．また，固有値 λ に属する固有ベクトル $|v\rangle$ を固有値と同じ文字を用いて $|\lambda\rangle$ と表すことがある．

例題 6.1 (1) 正則行列 $A \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ に対して，$0 \notin \mathrm{Spec}(A)$ を示せ．また，$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，$\lambda^{-1} \in \mathrm{Spec}(A^{-1})$ を示せ．

(2) $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(n;\mathbb{C})$, $\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$, $\mu \in \mathrm{Spec}(B)$ とする．このとき，$\lambda\mu \in \mathrm{Spec}(A \otimes B)$ を示せ．

解答： (1) $0 \in \mathrm{Spec}(A)$ と仮定すると，(6.1) は $A|v\rangle = \mathbf{0}$ $(|v\rangle \neq \mathbf{0})$ となる．両辺に左から A^{-1} をかけると，$|v\rangle = \mathbf{0}$ が得られて矛盾する．したがって，$0 \notin \mathrm{Spec}(A)$ である．また，$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，(6.1) の両辺に左から $\lambda^{-1}A^{-1}$ を作用させることにより，

$$A^{-1}|v\rangle = A^{-1}(\lambda^{-1}\lambda|v\rangle) = \lambda^{-1}A^{-1}(A|v\rangle) = \lambda^{-1}|v\rangle$$

が得られる．$|v\rangle \neq \mathbf{0}$ より，$\lambda^{-1} \in \mathrm{Spec}(A^{-1})$ であり，$|v\rangle$ がその固有ベクトルである．

(2) $A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$, $B|\mu\rangle = \mu|\mu\rangle$ とする．このとき，(2.2) より，

$$(A \otimes B)(|\lambda\rangle \otimes |\mu\rangle) = A|\lambda\rangle \otimes B|\mu\rangle = \lambda|\lambda\rangle \otimes \mu|\mu\rangle = \lambda\mu(|\lambda\rangle \otimes |\mu\rangle)$$

が得られる．したがって $\lambda\mu \in \mathrm{Spec}(A \otimes B)$ であり，$|\lambda\rangle \otimes |\mu\rangle$ がその固有ベクトルである． □

問 6.1 $A, B \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，次を示せ．

(1) $\mathrm{Spec}(AB) = \mathrm{Spec}(BA)$

(2) $B = P^{-1}AP$ $(P \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C}))$ であるとき，$\mathrm{Spec}(A) = \mathrm{Spec}(B)$.

問 6.2 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(n;\mathbb{C})$, $\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$, $\mu \in \mathrm{Spec}(B)$ とする．このとき，$\lambda + \mu \in \mathrm{Spec}(A \otimes I_n + I_m \otimes B)$ を示せ．

6-1-2 固有値方程式

固有値を効率よく求めるにはどうしたらよいか考えよう．(6.1) を

$$(A - \lambda I_n)|v\rangle = \mathbf{0} \tag{6.2}$$

と変形すると，$|v\rangle \neq \mathbf{0}$ は係数行列 $A - \lambda I_n$ が逆行列をもたないことと同値であり，さらにそれは $\det(A - \lambda I_n) = 0$ と同値である (定理 2.3 参照).

$$D_A(t) := \det(A - tI_n)$$

を A の特性関数といい，方程式

$$D_A(t) = \det(A - tI_n) = 0$$

を A の特性方程式，または固有値方程式という．行列式の定義 (2.3) より，

$$D_A(t) = \det \begin{pmatrix} A_{11} - t & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - t & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} - t \end{pmatrix} \tag{6.3}$$

$$= \sum_{\sigma \in S_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{j=1}^{n} (A_{j\sigma(j)} - t\delta_{j\sigma(j)}) \tag{6.4}$$

$$= (-t)^n + d_{n-1}(-t)^{(n-1)} + \cdots + d_0 \quad (d_{n-1}, \ldots, d_0 \in \mathbb{C}) \tag{6.5}$$

であり，特性関数 $D_A(t)$ は t についての n 次多項式になる．代数学の基本定理により，固有値方程式 $D_A(t) = 0$ は $\mathbb{C}$ 内に重複を込めて n 個の解をもつ．これを $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ とする．ある解 λ が g 重解であるとき，λ は g 重に縮退または縮重しているといい，g を λ の縮退度という．縮退を考慮して，互いに異なる解を $\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r$ (r はその個数) とし，各 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ の縮退度を g_α で表すと便利である．以下本書では，これらの記法を用いる．

定理 6.1 n 次正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ の固有値は $\mathbb{C}$ 内に重複を込めて n 個存在する：

$$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n \in \operatorname{Spec}(A) = \{\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r\}, \quad g_1 + g_2 + \cdots + g_r = n.$$

A の固有値と A の行列式，跡の間には次の関係がある．これらは具体的な計算を行うとき，検算に用いると便利である．

命題 6.1 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\det A = \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n = \widetilde{\lambda}_1^{g_1} \widetilde{\lambda}_2^{g_2} \cdots \widetilde{\lambda}_r^{g_r},$$

$$\operatorname{tr} A = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n = g_1 \widetilde{\lambda}_1 + g_2 \widetilde{\lambda}_2 + \cdots + g_r \widetilde{\lambda}_r.$$

証明： A の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ は固有値方程式 $D_A(t) = 0$ の解なので，因数定理により

$$D_A(t) = (\lambda_1 - t)(\lambda_2 - t)\cdots(\lambda_n - t) \tag{6.6}$$

と表される．(6.4) と (6.6) に $t = 0$ を代入すると $D_A(0) = \det A = \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n$ が得られる．次に，t^{n-1} の係数を比較する．(6.6) の展開における t^{n-1} に寄与する項は $(-t)^{n-1}(\lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n)$ である．一方，(6.4) の展開における t^{n-1} に寄与する項は対角行列要素の積のみから得られ，それは $(-t)^{n-1}\sum_{j=1}^{n} A_{jj} = (-t)^{n-1}\mathrm{tr}\,A$ である． ∎

問 6.3 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，$\lambda^* \in \mathrm{Spec}(A^\dagger)$ を示せ．

6-1-3 固有空間

次に，固有ベクトルを効率よく求める方法について考えよう．(6.2) を満たす $|v\rangle \in \mathbb{C}^n$ 全体の集合は

$$V_\lambda := \mathrm{Ker}\,(A - \lambda I_n)$$

であり，$\mathbb{C}^n$ の部分空間になっている (命題 5.1 参照)．定義 6.1 により，λ が固有値であることと，$V_\lambda \neq \{\mathbf{0}\}$ が同値であり，その $\mathbf{0}$ でない元が固有ベクトルである．$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，V_λ を固有値 λ に属する A の固有空間という．固有空間の次元を $d = \dim V_\lambda$ とするとき[1]，その基底ベクトルを $|\lambda; 1\rangle, \ldots, |\lambda; d\rangle$ で表すことがある．

例 6.1 $A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$ の固有値と固有空間を求めよう．

固有値方程式

$$D_A(t) = \det(A - tI) = \begin{vmatrix} 2-t & 2 & 1 \\ 1 & 3-t & 1 \\ 1 & 2 & 2-t \end{vmatrix} = (1-t)^2(5-t) = 0$$

より，$\lambda_1 = \lambda_2 = 1,\ \lambda_3 = 5$ である．縮退を考慮するとき，$\widetilde{\lambda}_1 = 1\,(g_1 = 2)$, $\widetilde{\lambda}_2 = 5\,(g_2 = 1)$ と表し，$\mathrm{Spec}(A) = \{1, 5\}$ である．$\mathrm{tr}\,A = 7, \det A = 5$ なので，命題 6.1 が成り立つことも確かめられる．

1) λ の縮退度 g を代数的縮退度，V_λ の次元 d を幾何学的縮退度と区別することがある．

次に，固有空間は

$$V_1 = \mathrm{Ker}(A - I) = \mathrm{Ker}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{Span}\left(\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}\right\}\right),$$

$$V_5 = \mathrm{Ker}(A - 5I) = \mathrm{Ker}\begin{pmatrix} -3 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & -3 \end{pmatrix} = \mathrm{Span}\left(\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\right\}\right)$$

となる．例えば，$|1;1\rangle = (1,0,-1)^t$, $|1;2\rangle = (0,1,-2)^t$, $|5;1\rangle = (1,1,1)^t$ ととることができる．

問 6.4 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & i & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ の固有値と固有空間を求めよ．

6-1-4 対角化の原理

例 6.1 で得られた 3 つの固有ベクトル $|1;1\rangle = (1,0,-1)^t$, $|1;2\rangle = (0,1,-2)^t$, $|5;1\rangle = (1,1,1)^t$ は線形独立であり，$\mathbb{C}^3$ の基底になっている．よって，これらを列ベクトルにもつ 3 次正方行列

$$P = \begin{pmatrix} |1;1\rangle & |1;2\rangle & |5;1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

は正則行列である (定理 2.3 参照)．このとき，(6.1) より，

$$\begin{aligned} AP &= \begin{pmatrix} A|1;1\rangle & A|1;2\rangle & A|5;1\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |1;1\rangle & |1;2\rangle & 5|5;1\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |1;1\rangle & |1;2\rangle & |5;1\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる．両辺に左から P^{-1} をかけることにより，$P^{-1}AP$ は固有値を対角要素にもつ対角行列になる．これを行列 A の対角化という．

すべての正方行列が対角化できるとは限らない．そのため，6-2 節で固有

空間の構造を調べ，6-3 節でその必要十分条件を考える．応用に興味がある読者は，6-4 節に進んでもよい．

6-2 固有空間の性質

一般の固有空間の重要な性質を 2 つ証明する．これらに関しての具体例は例 6.1 を参照されたい．正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ のスペクトル集合を $\mathrm{Spec}(A) = \{\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r\}$ とする．

定理 6.2 固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ に対して，その代数的縮退度 g_α と幾何学的縮退度 $d_\alpha = \dim V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ は，次の不等式を満たす：

$$1 \leq d_\alpha \leq g_\alpha.$$

証明： $1 \leq d_\alpha$ は 6-1-3 項ですでに示した．

次に，$|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots, |v_{d_\alpha}\rangle$ を $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ の基底ベクトルとし，さらに線形独立な $(n-d_\alpha)$ 個のベクトル $|x_{d_\alpha+1}\rangle, |x_{d_\alpha+2}\rangle, \ldots, |x_n\rangle$ を適当に付け加えて $\mathbb{C}^n$ の基底をつくる．これらを順に列ベクトルにもつ n 次正則行列を P とする．$|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots, |v_{d_\alpha}\rangle$ は固有ベクトルなので，対角化の原理 (6-1-4 項参照) より，

$$AP = P\begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_\alpha I_{d_\alpha} & B \\ O & C \end{pmatrix}$$

となる．ただし，$B \in M(d_\alpha, n-d_\alpha;\mathbb{C}), C \in M(n-d_\alpha;\mathbb{C})$ である．このとき，A の特性関数は，行列式の性質 (定理 2.3 参照) より，

$$\begin{aligned} D_A(t) &= \det\left(P\begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_\alpha I_{d_\alpha} & B \\ O & C \end{pmatrix}P^{-1} - tI_n\right) \\ &= \det\left(P\left(\begin{pmatrix} \widetilde{\lambda}_\alpha I_{d_\alpha} & B \\ O & C \end{pmatrix} - tI_n\right)P^{-1}\right) \\ &= \det\begin{pmatrix} (\widetilde{\lambda}_\alpha - t)I_{d_\alpha} & B \\ O & C - tI_{n-d_\alpha} \end{pmatrix} \\ &= (\widetilde{\lambda}_\alpha - t)^{d_\alpha}\det(C - tI_{n-d_\alpha}) \end{aligned} \tag{6.7}$$

となる．ここで，$\widetilde{\lambda}_\alpha$ は方程式 $D_A(t) = 0$ の g_α 重解なので，$d_\alpha \leq g_\alpha$ が成り立つ． ∎

定理 6.3 互いに異なる固有値に属する固有ベクトル $|\widetilde{\lambda}_1\rangle, |\widetilde{\lambda}_2\rangle, \ldots, |\widetilde{\lambda}_r\rangle$ は線形独立である[2)].

証明： 方程式

$$c_1|\widetilde{\lambda}_1\rangle + c_2|\widetilde{\lambda}_2\rangle + \cdots + c_r|\widetilde{\lambda}_r\rangle = \mathbf{0}$$

を考える．この解が $c_1 = c_2 = \cdots = c_r = 0$ のみであることを示す．この両辺に左から A^j $(j = 0, 1, \ldots, r-1)$ を作用させると

$$A^j(c_1|\widetilde{\lambda}_1\rangle + c_2|\widetilde{\lambda}_2\rangle + \cdots + c_r|\widetilde{\lambda}_r\rangle) = \mathbf{0}$$

となるが，これは (6.1) より，

$$\begin{array}{lllll}
j=0: & c_1\,|\widetilde{\lambda}_1\rangle + & c_2\,|\widetilde{\lambda}_2\rangle + \cdots + & c_r\,|\widetilde{\lambda}_r\rangle = \mathbf{0} \\
j=1: & c_1\widetilde{\lambda}_1\,|\widetilde{\lambda}_1\rangle + & c_2\widetilde{\lambda}_2\,|\widetilde{\lambda}_2\rangle + \cdots + & c_r\widetilde{\lambda}_r\,|\widetilde{\lambda}_r\rangle = \mathbf{0} \\
\vdots & & \vdots & \\
j=r-1: & c_1\widetilde{\lambda}_1^{r-1}\,|\widetilde{\lambda}_1\rangle + & c_2\widetilde{\lambda}_2^{r-1}\,|\widetilde{\lambda}_2\rangle + \cdots + & c_r\widetilde{\lambda}_r^{r-1}\,|\widetilde{\lambda}_r\rangle = \mathbf{0}
\end{array}$$

となる．これを行列表示すると，

$$\begin{pmatrix} c_1|\widetilde{\lambda}_1\rangle & c_2|\widetilde{\lambda}_2\rangle & \cdots & c_r|\widetilde{\lambda}_r\rangle \end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
1 & \widetilde{\lambda}_1 & \widetilde{\lambda}_1^2 & \cdots & \widetilde{\lambda}_1^{r-1} \\
1 & \widetilde{\lambda}_2 & \widetilde{\lambda}_2^2 & \cdots & \widetilde{\lambda}_2^{r-1} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
1 & \widetilde{\lambda}_r & \widetilde{\lambda}_r^2 & \cdots & \widetilde{\lambda}_r^{r-1}
\end{pmatrix} = O \tag{6.8}$$

となる．左辺の 2 つ目の行列はファンデルモンド行列 $V(\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r)$ (定義 2.10 参照) であり，$\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r$ は互いに異なるので，定理 2.6 からその行列式は 0 ではなく，$V(\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r)$ は逆行列をもつ．(6.8) の両辺に，右から $V(\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_2, \ldots, \widetilde{\lambda}_r)^{-1}$ をかけると，

$$\begin{pmatrix} c_1|\widetilde{\lambda}_1\rangle & c_2|\widetilde{\lambda}_2\rangle & \cdots & c_r|\widetilde{\lambda}_r\rangle \end{pmatrix} = O$$

が得られる．$|\widetilde{\lambda}_1\rangle, |\widetilde{\lambda}_2\rangle, \ldots, |\widetilde{\lambda}_r\rangle \neq \mathbf{0}$ より，$c_1 = c_2 = \cdots = c_r = 0$ でなければならない． ∎

2) これを固有空間の和 $V_{\widetilde{\lambda}_1} + \cdots + V_{\widetilde{\lambda}_r}$ が直和であるといい，$V_{\widetilde{\lambda}_1} \oplus \cdots \oplus V_{\widetilde{\lambda}_r}$ と表す．

6-3 対角化可能行列

6-1-4 項での考察によれば，A はその固有ベクトルからなる $\mathbb{C}^n$ の基底が存在するときに対角化可能である．これを一般的に証明しよう．

定義 6.2 正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．正則行列 $P \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ が存在して，$P^{-1}AP$ [3] が対角行列となるとき，A は対角化可能行列であるという．

紙数を節約するために，対角行列 $\begin{pmatrix} c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & c_n \end{pmatrix}$ を

$$\mathrm{diag}(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

と表すことがある．

定理 6.4 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，次の 3 つの条件は互いに同値である．

(1) A は対角化可能である．

(2) A は n 個の線形独立な固有ベクトルの組をもつ．

(3) すべての固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ に対して，$d_\alpha = g_\alpha$ が成り立つ[4]．

証明： (3) $\to$ (2) $\to$ (1) $\to$ (3) を示す．

(3) を仮定するとき，定理 6.1, 6.3 より，$V_{\widetilde{\lambda}_1}, \dots, V_{\widetilde{\lambda}_r}$ の基底をあわせたものが $\mathbb{C}^n$ の基底となる．よって，(2) が得られた．

次に (2) を仮定する．n 個の線形独立な固有ベクトルの組を $\{|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle, \dots, |\lambda_n\rangle\}$ とする．これらを列ベクトルにもつ n 次正則行列を $P = \begin{pmatrix} |\lambda_1\rangle & |\lambda_2\rangle & \cdots & |\lambda_n\rangle \end{pmatrix}$ とする．(6.1) より (6-1-4 項参照),

$$AP = \begin{pmatrix} \lambda_1|\lambda_1\rangle & \lambda_2|\lambda_2\rangle & \cdots & \lambda_n|\lambda_n\rangle \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

となる．両辺に左から P^{-1} をかけることにより，$P^{-1}AP$ は固有値を対角要素にもつ

---

3) $P^{-1}AP$ を A の相似変換という．相似変換は $M(n;\mathbb{C})$ に同値関係を定める．

4) 定理 6.3 とあわせると，$\mathbb{C}^n = V_{\widetilde{\lambda}_1} \oplus \cdots \oplus V_{\widetilde{\lambda}_r}$ を意味する．

対角行列となる．よって，(1) が得られた．

最後に，(1) を仮定する．$P \in \mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$ が存在して $P^{-1}AP = \mathrm{diag}(c_1, \ldots, c_n)$ と表されたとする．このとき，A の特性関数は (6.7) と同様にして

$$\begin{aligned} D_A(t) &= \det(A - tI_n) \\ &= \det(P\,\mathrm{diag}(c_1, \ldots, c_n)\,P^{-1} - tI_n) = (c_1 - t)\cdots(c_n - t) \end{aligned}$$

となる．よって，$c_1, \ldots, c_n$ は A の固有値である．$\widetilde{\lambda}_\alpha \in \mathrm{Spec}(A)$ をとる．順を並べ替えて，$c_1 = \cdots = c_{g_\alpha} = \widetilde{\lambda}_\alpha$, $c_{g_\alpha+1}, \ldots, c_n \neq \widetilde{\lambda}_\alpha$ としてよい．このとき，

$$\begin{aligned} V_{\widetilde{\lambda}_\alpha} &= \mathrm{Ker}(A - \widetilde{\lambda}_\alpha I_n) \\ &= \left\{ |v\rangle \in \mathbb{C}^n \;\middle|\; P \begin{pmatrix} O_{g_\alpha} & O_{g_\alpha, n-g_\alpha} \\ O_{n-g_\alpha, g_\alpha} & B \end{pmatrix} P^{-1}|v\rangle = \mathbf{0} \right\} \end{aligned}$$

となる．ただし，$B = \mathrm{diag}(c_{g_\alpha+1} - \widetilde{\lambda}_\alpha, \ldots, c_n - \widetilde{\lambda}_\alpha) \in \mathrm{GL}(n - g_\alpha;\mathbb{C})$ である．次元定理 (定理 5.1) より，

$$d_\alpha = \dim V_{\widetilde{\lambda}_\alpha} = n - \mathrm{rank}(A - \widetilde{\lambda}_\alpha I_n) = n - \mathrm{rank}\,B = n - (n - g_\alpha) = g_\alpha,$$

すなわち (3) が得られた． ∎

特に，固有値が縮退していなければ (3) が成り立つので，次の系が得られる．

系 6.1 $A \in M(n;\mathbb{C})$ の固有値がすべて異なれば，A は対角化可能である．

例題 6.2 次の行列が対角化可能かどうか調べよ．

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 4 \end{pmatrix}, \qquad C = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 5 \end{pmatrix}$$

解答： A の固有値方程式は

$$D_A(t) = \det(A - tI) = \begin{vmatrix} -t & 0 & i \\ 0 & 1-t & 0 \\ i & 0 & -t \end{vmatrix} = (1-t)(1+t^2) = 0$$

であり，A の固有値は $1, \pm i$ である．縮退していないので，A は対角化可能である．

B の固有値方程式は

$$D_B(t) = \det(B - tI) = \begin{vmatrix} 3-t & 1 & -1 \\ -2 & -1-t & 3 \\ -1 & -2 & 4-t \end{vmatrix} = (2-t)^3 = 0$$

であり，B の固有値は 2 (縮退度 3) である．固有空間の次元は

$$\begin{aligned}\dim V_2 &= \dim \mathrm{Ker}(B-2I)\\ &= 3-\dim \mathrm{Im}(B-2I) = 3-\mathrm{rank}\begin{pmatrix}1 & 1 & -1\\ -2 & -3 & 3\\ -1 & -2 & 2\end{pmatrix} = 1\end{aligned}$$

であり，縮退度と等しくないので，B は対角化不可能である．

C の固有値方程式は

$$D_C(t) = \det(C-tI) = \begin{vmatrix}2-t & 0 & 2\\ 0 & 1-t & 0\\ 2 & 0 & 5-t\end{vmatrix} = (1-t)^2(6-t) = 0$$

であり，C の固有値は 1 (縮退度 2)，6 (縮退度 1) である．固有値 1 に属する固有空間の次元は

$$\begin{aligned}\dim V_1 &= \dim \mathrm{Ker}(C-I)\\ &= 3-\dim \mathrm{Im}(C-I) = 3-\mathrm{rank}\begin{pmatrix}1 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 0\\ 2 & 0 & 4\end{pmatrix} = 2\end{aligned}$$

であり，縮退度と等しいので，C は対角化可能である． □

問 6.5 次の行列が対角化可能かどうか調べよ．また，対角化可能行列は対角化せよ．

$$A = \begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & i & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}, \qquad B = \begin{pmatrix}3 & 3 & 1\\ -1 & -1 & -1\\ 2 & 6 & 4\end{pmatrix}, \qquad C = \begin{pmatrix}3 & 1 & 1\\ 1 & 3 & 1\\ 1 & 1 & 3\end{pmatrix}$$

例題 6.1 と定理 6.4 より，次の結果が得られる．

定理 6.5 $A \in M(m;\mathbb{C})$, $B \in M(n;\mathbb{C})$ が対角化可能であるとき，テンソル積 $A \otimes B$ も対角化可能である．

証明： A, B は対角化可能なので，A, B はそれぞれ m, n 個の線形独立な固有ベクトルの組をもつ．それらを $\{|\lambda_1\rangle, \ldots, |\lambda_m\rangle\}$, $\{|\mu_1\rangle, \ldots, |\mu_n\rangle\}$ とする．例題 6.1 (2) より，$|\lambda_j\rangle \otimes |\mu_k\rangle$ $(j=1,\ldots,m,\ k=1,\ldots,n)$ が $A \otimes B$ の固有ベクトルである．$A \otimes B$ は mn 個の線形独立な固有ベクトルの組をもつので，対角化可能である． ∎

6-4　固有値・固有ベクトルの応用

行列の固有値，固有ベクトルを利用することでさまざまな計算が容易になる．それらを例題をとおして眺めてみよう．本書では対角化可能行列を主に扱うので，7 章で学ぶスペクトル分解を用いるとより見通しがよい．

6-4-1　行列関数

ほとんどの場合 $A, A^2, A^3, \ldots$ から A^k の一般項を推測することは難しい．しかし，対角化を利用することで A^k の計算が容易になる．

例題 6.3　$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$ とする．このとき，A^k $(k = 1, 2, \ldots)$ および指数関数 e^{tA} (定義 3.1 参照) を行列要素を用いて表せ．

解答：　$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$ とおくことにより，A は $P^{-1}AP = \mathrm{diag}(1, 1, 5)$ と対角化できる (例 6.1 と 6-1-4 項参照)．したがって，

$$\begin{aligned} A^k &= (P\,\mathrm{diag}(1,1,5)\,P^{-1})^k = P\,\mathrm{diag}(1,1,5)^k\,P^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{5^k+3}{4} & \frac{5^k-1}{2} & \frac{5^k-1}{4} \\ \frac{5^k-1}{4} & \frac{5^k+1}{2} & \frac{5^k-1}{4} \\ \frac{5^k-1}{4} & \frac{5^k-1}{2} & \frac{5^k+3}{4} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる．また，

$$e^{tA} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k A^k}{k!} = P \begin{pmatrix} e^t & 0 & 0 \\ 0 & e^t & 0 \\ 0 & 0 & e^{5t} \end{pmatrix} P^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{e^{5t}+3e^t}{4} & \frac{e^{5t}-e^t}{2} & \frac{e^{5t}-e^t}{4} \\ \frac{e^{5t}-e^t}{4} & \frac{e^{5t}+e^t}{2} & \frac{e^{5t}-e^t}{4} \\ \frac{e^{5t}-e^t}{4} & \frac{e^{5t}-e^t}{2} & \frac{e^{5t}+3e^t}{4} \end{pmatrix}$$

となる．　□

問 6.6　$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 5 \end{pmatrix}$ に対して，A^k $(k = 1, 2, \ldots)$ および e^{tA} を行列要素を

用いて表せ.

6-4-2 線形漸化式

行列のべき乗計算を線形漸化式に応用しよう.隣接 2 項間以外の項を含む高階線形漸化式は,ベクトルを導入することで隣接 2 項間の漸化式に帰着できる.この場合,固有ベクトルを基底として問題を考えると,6-4-1 項の行列のべき乗計算自体は必要ない.

例題 6.4 漸化式

$$x_{n+3} = x_{n+2} - x_{n+1} + x_n \quad (n = 0, 1, 2, \ldots),$$
$$x_0 = 5, \quad x_1 = 1, \quad x_2 = -3$$

によって定まる数列 $\{x_n\}$ に対して,x_{100} の値を求めよ.

解答: ベクトル $|V_n\rangle := (x_n,\, x_{n+1},\, x_{n+2})^t$ を導入すると,漸化式は

$$|V_{n+1}\rangle = A|V_n\rangle, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

と表される.この一般項は

$$|V_n\rangle = A|V_{n-1}\rangle = A^2|V_{n-2}\rangle = \cdots = A^n|V_0\rangle$$

である.さて,A の固有値問題を解くと,A の固有値は $\lambda_1 = i$, $\lambda_2 = -i$, $\lambda_3 = 1$ であり,固有ベクトルは $|\lambda_1\rangle = (1, i, -1)^t$, $|\lambda_2\rangle = (1, -i, -1)^t$, $|\lambda_3\rangle = (1, 1, 1)^t$ にとることができる.$|V_0\rangle$ を固有ベクトルで展開すると

$$|V_0\rangle = (5, 1, -3)^t = 2|\lambda_1\rangle + 2|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle$$

となる.したがって,

$$|V_{100}\rangle = A^{100}|V_0\rangle = 2 \cdot i^{100}|\lambda_1\rangle + 2(-i)^{100}|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle = (5, 1, -3)^t$$

が得られる.したがって,$x_{100} = 5$ である. □

問 6.7 漸化式

$x_{n+3} = -2x_{n+2} + x_{n+1} + 2x_n$ $(n = 0, 1, 2, \ldots)$, $x_0 = 2$, $x_1 = 1$, $x_2 = -1$

によって定まる数列 $\{x_n\}$ に対して,x_{10} の値を求めよ.

6-4-3 線形微分方程式

行列の指数関数は線形微分方程式の解法にも応用がある．2 階，またはそれ以上の微分を含む高階単独線形微分方程式は，ベクトルを導入することで 1 階微分方程式に帰着できる．解析力学で，時間に関して 2 階のラグランジュ方程式が，運動量を導入することによって 1 階のハミルトン方程式に書かれたことを思い出そう．6-4-2 項と同様に，固有ベクトルを基底として問題を考えると，6-4-1 項の行列の指数関数の計算自体は必要ない．

例題 6.5 (1) 微分方程式

$$x'''(t) = x''(t) - x'(t) + x(t) \tag{6.9}$$

の一般解 $x(t)$ を求めよ．

(2) 初期値 $x(0) = 5,\ x'(0) = 1,\ x''(0) = -3$ を満たす (6.9) の解を求めよ．

解答： (1) ベクトル $|V(t)\rangle = (x(t),\, x'(t),\, x''(t))^t$ を導入すると，微分方程式は

$$\frac{d}{dt}|V(t)\rangle = A|V(t)\rangle, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

と表される．この微分方程式の一般解は

$$|V(t)\rangle = e^{tA}|V(0)\rangle$$

である．実際，命題 3.4 より，

$$\frac{d}{dt}|V(t)\rangle = \frac{d}{dt}[e^{tA}|V(0)\rangle] = Ae^{tA}|V(0)\rangle = A|V(t)\rangle$$

となる．A は例題 6.4 で扱った行列と同じであり，固有値と固有ベクトルはそこで求めたものを用いる．

$|V(t)\rangle$ を A の固有ベクトルで展開し，$|V(t)\rangle = c_1|\lambda_1\rangle + c_2|\lambda_2\rangle + c_3|\lambda_3\rangle$ とする．ここで，固有ベクトル $|\lambda_j\rangle$ $(j = 1, 2, 3)$ に対しては

$$e^{tA}|\lambda_j\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k A^k}{k!}|\lambda_j\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k \lambda_j^k}{k!}|\lambda_j\rangle = e^{\lambda_j t}|\lambda_j\rangle$$

となるので，

$$|V(t)\rangle = c_1 e^{\lambda_1 t}|\lambda_1\rangle + c_2 e^{\lambda_2 t}|\lambda_2\rangle + c_3 e^{\lambda_3 t}|\lambda_3\rangle$$

$$= \begin{pmatrix} c_1e^{it} + c_2e^{-it} + c_3e^t \\ c_1ie^{it} - ic_2e^{-it} + c_3e^t \\ -c_1e^{it} - c_2e^{-it} + c_3e^t \end{pmatrix}$$

となる．したがって，$x(t) = c_1e^{it} + c_2e^{-it} + c_3e^t = c_1' \cos t + c_2' \sin t + c_3e^t$ である．

(2) $|V(0)\rangle = (5, 1, -3)^t$ を固有ベクトルで展開すると $|V(0)\rangle = 2|\lambda_1\rangle + 2|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle$ となる．したがって，

$$|V(t)\rangle = 2e^{it}|\lambda_1\rangle + 2e^{-it}|\lambda_2\rangle + e^t|\lambda_3\rangle = \begin{pmatrix} 4\cos t + e^t \\ -4\sin t + e^t \\ -4\cos t + e^t \end{pmatrix}$$

が得られる．これから $x(t) = 4\cos t + e^t$ が得られる． □

問 6.8 問 6.7 の結果を利用して，微分方程式

$$x'''(t) = -2x''(t) + x'(t) + 2x(t)$$

の一般解 $x(t)$，および初期値 $x(0) = 2$, $x'(0) = 1$, $x''(0) = -1$ を満たす解を求めよ．

単独微分方程式に限らず一般の連立線形微分方程式系も解くことができる．

例題 6.6 (1) 連立微分方程式系

$$x'(t) = x(t) + y(t), \quad y'(t) = x(t) + z(t), \quad z'(t) = y(t) + z(t) \qquad (6.10)$$

の一般解 $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ を求めよ．

(2) 初期値 $x(0) = 0$, $y(0) = 4$, $z(0) = 2$ を満たす (6.10) の解を求めよ．

解答： (1) ベクトル $|V(t)\rangle = (x(t), y(t), z(t))^t$ を導入すると，連立微分方程式系は

$$\frac{d}{dt}|V(t)\rangle = A|V(t)\rangle, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

と表される．A の固有値は $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = -1$ であり，固有ベクトルは $|\lambda_1\rangle = (1, 1, 1)^t$, $|\lambda_2\rangle = (1, 0, -1)^t$, $|\lambda_3\rangle = (1, -2, 1)^t$ にとることができる．$|V(t)\rangle$ を固有ベクトルで展開し，$|V(t)\rangle = c_1|\lambda_1\rangle + c_2|\lambda_2\rangle + c_3|\lambda_3\rangle$ とすると，一般解

$$|V(t)\rangle = c_1e^{\lambda_1 t}|\lambda_1\rangle + c_2e^{\lambda_2 t}|\lambda_2\rangle + c_3e^{\lambda_3 t}|\lambda_3\rangle = \begin{pmatrix} c_1e^{2t} + c_2e^t + c_3e^{-t} \\ c_1e^{2t} - 2c_3e^{-t} \\ c_1e^{2t} - c_2e^t + c_3e^{-t} \end{pmatrix}$$

が得られる．

(2) $|V(0)\rangle = (0,3,1)^t$ を固有ベクトルで展開すると，$|V(0)\rangle = 2|\lambda_1\rangle - |\lambda_2\rangle - |\lambda_3\rangle$ となる．したがって，

$$|V(t)\rangle = 2e^{\lambda_1 t}|\lambda_1\rangle - e^{\lambda_2 t}|\lambda_2\rangle - e^{\lambda_3 t}|\lambda_3\rangle = \begin{pmatrix} 2e^{2t} - e^t - e^{-t} \\ 2e^{2t} + 2e^{-t} \\ 2e^{2t} + e^t - e^{-t} \end{pmatrix}$$

が得られる． □

問 6.9 連立線形微分方程式系

$$x'(t) = y(t), \quad y'(t) = x(t) + y(t) + z(t), \quad z'(t) = y(t)$$

の一般解 $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$，および初期値 $x(0) = 1$, $y(0) = 3$, $z(0) = -1$ を満たす解を求めよ．

じつは，いつもこのようにうまくいくとは限らない．例として，連立微分方程式系

$$x'(t) = x(t) + y(t), \quad y'(t) = y(t)$$

を考えよう．係数行列は $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ であり，その固有値 1 は 2 重縮退している．その固有空間は

$$V_1 = \mathrm{Ker}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathrm{Span}\left(\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\right\}\right)$$

となり，A は対角化不可能である．係数行列が対角化不可能であるとき，すでに述べた方法で問題を解くことはできない．

しかし，A は上三角行列であり，そのような場合にはステップを追って微分方程式を解けばよい．まず，$y'(t) = y(t)$ より，$y(t) = c_1 e^t$ が得られる．それを $x(t)$ の微分方程式に代入すると，

$$x'(t) = x(t) + c_1 e^t$$

となる．$x(t)$ を左辺に移項して，両辺に e^{-t} をかけると

$$e^{-t}(x'(t) - x(t)) = (e^{-t}x(t))' = c_1$$

となる．両辺を t で積分することにより，$x(t) = c_1 t e^t + c_2 e^t$ が得られる．

対角化不可能な行列も上三角行列に変換でき (定理 6.6 参照), その場合, 連立微分方程式の解法はステップを追って解くことに帰着する.

6-5 行列の三角化

例題 6.2 の行列 B は固有値 2 が 3 重縮退していて,

$$V_2 = \mathrm{Ker}\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -2 & -3 & 3 \\ -1 & -2 & 2 \end{pmatrix} = \mathrm{Span}\left(\left\{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}\right\}\right)$$

であり, 対角化不可能であった. この行列に対角化の真似事を試みよう. 固有ベクトルのみで $\mathbb{C}^3$ の基底をつくることはできないが, 固有ベクトルを含む $\mathbb{C}^3$ の基底

$$|\lambda_1\rangle = (0,1,1)^t, \quad |e_1\rangle = (1,0,0)^t, \quad |e_2\rangle = (0,1,-1)^t$$

を考えよう. グラム–シュミットの正規直交化法により,

$$|\lambda_1\rangle = (0,1,1)^t/\sqrt{2}, \quad |e_1\rangle = (1,0,0)^t, \quad |e_2\rangle = (0,1,-1)^t/\sqrt{2}$$

にとり替えておく. このとき, これらを列ベクトルにもつユニタリー行列を P とすると,

$$\begin{aligned} P^{-1}BP &= P^\dagger BP \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 2 & -\frac{3}{\sqrt{2}} & -5 \\ 0 & 3 & \sqrt{2} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる. そこで, 次に右下のブロック $B' := \begin{pmatrix} 3 & \sqrt{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}$ の固有値問題を考えよう. B' の固有値は 2 (重複度 2) で,

$$V_2 = \mathrm{Ker}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} = \mathrm{Span}\left(\left\{\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}\right\}\right)$$

である．そこで，再び固有ベクトルを含む $\mathbb{C}^2$ の基底 $|\lambda_2\rangle = (\sqrt{2}, -1)^t$, $|e_3\rangle = (1, \sqrt{2})^t$ を考えよう．グラム–シュミットの正規直交化法により，これらを $|\lambda_2\rangle = (\sqrt{2}, -1)^t/\sqrt{3}$, $|e_3\rangle = (1, \sqrt{2})^t/\sqrt{3}$ にとり替えておく．このとき，これらを列ベクトルにもつ行列と (1) のブロック対角行列を

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{pmatrix}$$

とすると，Q はユニタリー行列であり，

$$(PQ)^\dagger B(PQ) = Q^{-1}(P^{-1}BP)Q = \begin{pmatrix} 2 & \frac{2}{\sqrt{3}} & -\frac{13}{\sqrt{6}} \\ 0 & 2 & \frac{3}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

となる．このようにして，対角行列ではないが B を対角要素が固有値である上三角行列に変形することができた．

すべての行列が対角化可能であるとは限らないが，そのような場合でも，この例のようにユニタリー行列を用いて固有値を対角要素にもつ上三角行列に変換することができる．これを行列の三角化という．

定理 6.6　任意の正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$U^\dagger AU$ が上三角行列となるユニタリー行列 $U \in \mathrm{U}(n)$ が存在する．

証明：　n に関する数学的帰納法で証明する．

$n = 1$ のときは，$A = \begin{pmatrix} A_{11} \end{pmatrix}$ であり，すでに三角化されている．例えば $U = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$ とすればよい．

$n \geq 2$ のとき，任意の $(n-1)$ 次正方行列がユニタリー行列による相似変換で上三角行列にできると仮定する．A の固有値 λ とその規格化された固有ベクトル $|\lambda\rangle$ をとる．適当にベクトルを $(n-1)$ 個付け加えて $\mathbb{C}^n$ の基底をつくり，グラム–シュミットの正規直交化法により，$\mathbb{C}^n$ の正規直交基底 $\{|\lambda\rangle, |x_1\rangle, |x_2\rangle, \ldots, |x_{n-1}\rangle\}$ をつくる．これらを列ベクトルにもつユニタリー行列を $U_1 := \begin{pmatrix} |\lambda\rangle & |x_1\rangle & \cdots & |x_{n-1}\rangle \end{pmatrix}$ とする．$X = \begin{pmatrix} |x_1\rangle & \cdots & |x_{n-1}\rangle \end{pmatrix}$ とおくと，

$$U_1^\dagger AU_1 = \begin{pmatrix} \langle\lambda| \\ X^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A|\lambda\rangle & AX \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\lambda| \\ X^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda|\lambda\rangle & AX \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & \langle\lambda|AX \\ \mathbf{0} & X^\dagger AX \end{pmatrix}$$

が得られる．ここで，数学的帰納法の仮定によって，$X^\dagger AX \in M(n-1;\mathbb{C})$ に対して，$U'^\dagger(X^\dagger AX)U'$ が上三角行列 A' となるユニタリー行列 $U' \in \mathrm{U}(n-1)$ が存在する．そこで，$U_2 := (1) \oplus U'$, $U := U_1U_2$ とおくと，これらはユニタリー行列となり

$$U^\dagger AU = U_2^\dagger U_1^\dagger AU_1U_2 = \begin{pmatrix} \lambda & \langle\lambda|AXU' \\ \mathbf{0} & A' \end{pmatrix}$$

と上三角行列になる． ∎

固有ベクトルの概念を一般化することによって，任意の正方行列 A に対して，$P^{-1}AP$ を上三角行列のうちもっとも対角行列に近い形であるジョルダン標準形にすることができるが，本書の範囲を超えるのでジョルダン標準形の理論は扱わない．

問 6.10 命題 6.1 と定理 6.6 (後述) を用いて，命題 2.4 と命題 2.5 の別証明を与えよ．

6-6 ケーリー–ハミルトンの定理

2 次正方行列 $A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ の特性関数は

$$\begin{aligned} D_A(t) &= (A_{11}-t)(A_{22}-t) - A_{12}A_{21} \\ &= t^2 - (A_{11}+A_{22})t + (A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}) \end{aligned}$$

であるが，この t に A を代入すると，簡単な計算で，次のケーリー–ハミルトンの定理

$$A^2 - (A_{11}+A_{22})A + (A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21})I_2 = O_2$$

が成り立つことがわかる．三角化を応用して，これを一般の次数で証明しよう．

定理 6.7 正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ の特性関数を展開して，

$$D_A(t) = (-t)^n + d_{n-1}(-t)^{n-1} + \cdots + d_1(-t) + d_0$$

とする．このとき，

$$D_A(A) = (-A)^n + d_{n-1}(-A)^{n-1} + \cdots + d_1(-A) + d_0I_n = O_n \quad (6.11)$$

が成り立つ[5]．

証明： n に関する数学的帰納法で証明する．

$n = 1, 2$ のとき，(6.11) が成り立つことはすでにみた．

$n \geq 3$ のとき，任意の $(n-1)$ 次正方行列 B に対して，$D_B(B) = O_{n-1}$ が成り立つと仮定する．A をユニタリー行列 $U \in \mathrm{U}(n)$ で三角化し，$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$, $\langle v| \in M(1, n-1; \mathbb{C})$, $C \in M(n-1; \mathbb{C})$ を用いて，$U^\dagger A U = \begin{pmatrix} \lambda & \langle v| \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix}$ とブロック行列で表す．このとき，A の特性関数は，行列式の性質 (定理 2.3 参照) より，

$$D_A(t) = \det \begin{pmatrix} \lambda - t & \langle v| \\ \mathbf{0} & C - tI_{n-1} \end{pmatrix} = (\lambda - t) D_C(t)$$

となる．数学的帰納法の仮定により，$D_C(C) = O_{n-1}$ が成り立つ．ここで，

$$A^k = U \begin{pmatrix} \lambda & \langle v| \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix}^k U^\dagger = U \begin{pmatrix} \lambda^k & \langle v_k| \\ \mathbf{0} & C^k \end{pmatrix} U^\dagger \quad (k = 0, 1, \ldots)$$

となる．$\langle v_k| \in M(1, n-1; \mathbb{C})$ は k に依存して変化するブラ・ベクトルである．このとき $D_C(t)$ は t の多項式であるので，

$$\begin{aligned} D_A(A) &= (\lambda I_n - A) D_C(A) \\ &= U \begin{pmatrix} 0 & -\langle v| \\ \mathbf{0} & \lambda I_{n-1} - C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_C(\lambda) & \langle w| \\ \mathbf{0} & D_C(C) \end{pmatrix} U^\dagger \\ &= U \begin{pmatrix} 0 & -\langle v| \\ \mathbf{0} & \lambda I_{n-1} - C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_C(\lambda) & \langle w| \\ \mathbf{0} & O_{n-1} \end{pmatrix} U^\dagger = O_n \end{aligned}$$

となる．ただし，$\langle w| \in M(1, n-1; \mathbb{C})$ は $D_C(A)$ に現れるブロックである．∎

定理 6.7 の証明には行列の余因子を用いたものが知られている．例題 7.4 において，対角化可能行列に対して，スペクトル分解を用いた別証明を与える．

例 6.2　$B = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -2 & -1 & 3 \\ -1 & -2 & 4 \end{pmatrix}$ の固有関数は

$$D_B(t) = (2-t)^3 = 8 - 12t + 6t^2 - t^3$$

---

5)　$D_A(t) = \det(A - AI_n) = \det O = 0$ と勘違いされることが多いが，(6.5) の t に A を代入するのが正しく，それは $A - AI_n = O$ とはならない．$D_A(t)$ を展開して t に A を代入するのである．

である (例題 6.2 参照) ので，ケーリー–ハミルトンの定理より

$$B^3 - 6B^2 + 12B - 8I_3 = O_3$$

が成り立つ．これにより，

$$\begin{aligned} B^5 &= (B^2 + 6B + 24I_3)(B^3 - 6B^2 + 12B - 8I_3) + 80B^2 - 240B + 192I_3 \\ &= 80B^2 - 240B + 192I_3 = \begin{pmatrix} 112 & 80 & -80 \\ -80 & -128 & 160 \\ 0 & -80 & 112 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$B^{-1} = \frac{1}{8}(B^2 - 6B + 12I_3) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{5}{8} & \frac{11}{8} & -\frac{7}{8} \\ \frac{3}{8} & \frac{5}{8} & -\frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

となる．これにより，固有ベクトルを求めずに行列関数の計算を B の 2 次式の計算に帰着でき，行列の次数が低いときには有効な方法である．

行列のべき乗計算の工夫は，対角化可能行列に対しては，スペクトル分解を用いたものがある (7-2 節参照).

6-7 同時固有ベクトル

対角化可能な行列 $A, B \in M(n;\mathbb{C})$ が可換であるとき，2 つの行列は共通の固有ベクトルをもつ．これを同時固有ベクトルという．まず，ウォーミングアップとして A, B の固有値がともに縮退していない場合にこれを示そう．

A の固有値 λ に対して，

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle$$

の両辺に左から B を作用させる．$AB = BA$ より，

$$A(B|v\rangle) = BA|v\rangle = \lambda(B|v\rangle)$$

が得られる．これは，$B|v\rangle$ が再び A の固有ベクトルであることを表している．固有値は縮退していないので，$B|v\rangle$ は $|v\rangle$ のスカラー倍でなければならない．それを μ とおくと，

$$B|v\rangle = \mu|v\rangle$$

となり，$|v\rangle$ は，A, B 共通の固有ベクトル，すなわち同時固有ベクトルであることがわかる．

次に，固有値が縮退している場合を考える．まずは例を考えよう．

例 6.3

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を考えると，$[A, B] = O$ が成り立つ．A の固有値は $2, 1, 1$ であり，対応する固有ベクトルは $|2\rangle = (1, 0, 0)^t$, $|1; 1\rangle = (1, 0, -1)^t$, $|1; 2\rangle = (0, 1, 1)^t$ にとることができる．したがって，

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を用いて，A は

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と対角化される．このとき，$P^{-1}BP$ を計算すると，

$$P^{-1}BP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

となって，A の固有値 2 に対応する 1×1 ブロック $B_1 = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$ と，A の固有値 1 に対応する 2×2 のブロック $B_2 = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ のブロック対角行列となっている．そこで，三角化のときと同様に，B_2 の対角化を考えよう．B_2 の固有値は $1, -1$ であり，対応する固有ベクトルは $|1\rangle = (1, 0)^t$, $|-1\rangle = (1, 1)^t$ にとることができる．したがって，

$$P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を用いて，B_2 は

$$P_2^{-1}B_2P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

と対角化される．$P_1 = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$ とおく．また，

$$Q := P(P_1 \oplus P_2) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

とすれば，A, B は

$$Q^{-1}AQ = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Q^{-1}BQ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

とどちらも対角行列になる．これを同時対角化という．Q の各列ベクトルが同時固有ベクトルであり，A の固有値を最初に，B の固有値を後に記して，

$$|2,1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1,1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |1,-1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

と表すことがある．

このように，固有値が縮退している場合には，固有ベクトルをうまくとらなければ同時固有ベクトルにはならないが，ひとまず A の固有ベクトルを用いて B をブロック対角化することができるので，各ブロックを対角化しなおせばよいことがわかる．

逆も考えてみよう．対角化可能な行列 A, $B \in M(n;\mathbb{C})$ が n 個の同時固有ベクトルをもつとき，それらは可換であろうか？ 答えはイエスである．

定理 6.8 A, $B \in M(n;\mathbb{C})$ は対角化可能行列とする．このとき，次の 2 つの条件は同値である：

(1) $[A,B] = O$ (A, B は可換),

(2) A, B は同時対角化可能.

証明： (1) を仮定する．A の各固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ $(\alpha = 1,2,\ldots,r)$ に対して，その固有空間 $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ の基底を $\{|\widetilde{\lambda}_\alpha;1\rangle, |\widetilde{\lambda}_\alpha;2\rangle, \ldots, |\widetilde{\lambda}_\alpha;g_\alpha\rangle\}$ とする．仮定から，これらは全部で

n 個あり，それらを列ベクトルにもつ n 次正則行列

$$P = \Big(|\widetilde{\lambda}_1; 1\rangle \quad |\widetilde{\lambda}_1; 2\rangle \quad \cdots \quad |\widetilde{\lambda}_r; g_r\rangle \Big)$$

により，$P^{-1}AP = \mathrm{diag}(\widetilde{\lambda}_1, \widetilde{\lambda}_1, \ldots, \widetilde{\lambda}_r, \widetilde{\lambda}_r)$ と対角化される．そこで，P^{-1} の各行ベクトルを順に $(\widetilde{\lambda}_1; 1|$, $(\widetilde{\lambda}_1; 2|$, …, $(\widetilde{\lambda}_r; g_r|$ とする．

$$(\widetilde{\lambda}_\alpha; s|\widetilde{\lambda}_\beta; t\rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta_{st} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \ldots, r,\ s = 1, 2, \ldots, g_\alpha,\ t = 1, 2, \ldots, g_\beta)$$

が成り立つことに注意する．

さて，$P^{-1}BP$ を計算しよう．$A|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = \widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle$ $(k = 1, 2, \ldots, g_\alpha)$ の両辺に左から B を作用させる．仮定 $AB = BA$ より，

$$BA|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = AB|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = \widetilde{\lambda}_\alpha B|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle$$

が得られる．よって，$B|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle \in V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ となるので，展開して

$$B|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = \sum_{j=1}^{g_\alpha} c_{kj}^{(\alpha)}|\widetilde{\lambda}_\alpha; j\rangle \quad (c_{kj}^{(\alpha)} \in \mathbb{C})$$

と表される．したがって，

$$B_{st}^{(\alpha)} := (\widetilde{\lambda}_\alpha; s|B|\widetilde{\lambda}_\alpha; t\rangle = \sum_{j=1}^{g_\alpha} c_{tj}^{(\alpha)}\delta_{sj}$$

は一般には 0 ではない．一方，$\alpha \neq \beta$ のとき，$B|\widetilde{\lambda}_\alpha; t\rangle$ は $|\widetilde{\lambda}_\beta; s\rangle$ を含まないので，

$$(\widetilde{\lambda}_\beta; s|B|\widetilde{\lambda}_\alpha; t\rangle = 0$$

となる．したがって，$B^{(\alpha)} = \Big(B_{st}^{(\alpha)}\Big) \in M(g_\alpha; \mathbb{C})$ とおくと，

$$P^{-1}BP = B^{(1)} \oplus B^{(2)} \oplus \cdots \oplus B^{(r)}$$

とブロック対角行列になる．

次に，各 $B^{(\alpha)}$ を対角化しよう．このそれぞれが対角行列になるように $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ の基底を $\mathrm{GL}(n; \mathbb{C})$ で変換しても，これらのベクトルが $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ の基底であることには変わらないので，$P^{-1}AP$ は対角行列のままであることに注意する．α 番目のブロックを対角化する正則行列を $P_\alpha \in \mathrm{GL}(g_\alpha; \mathbb{C})$ とすると，A, B の両方を対角化する行列は

$$Q := P(P_1 \oplus P_2 \oplus \cdots \oplus P_r)$$

である．最初の P で A が対角化され，B はブロック対角化される．さらに，$(P_1 \oplus P_2 \oplus \cdots \oplus P_r)$ で $P^{-1}AP$ は対角行列のままであり，$P^{-1}BP$ の各ブロックが対角化される．したがって，(2) が得られた．Q の各列ベクトルを $|\widetilde{\lambda}_\alpha; s\rangle'$ で表すと，これらのベクトルは

$$A|\widetilde{\lambda}_\alpha; s\rangle' = \widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha; s\rangle' \quad (\widetilde{\lambda}_\alpha \in \mathrm{Spec}(A)),$$

$$B|\widetilde{\lambda}_\alpha; s\rangle' = \mu_{\alpha;s}|\widetilde{\lambda}_\alpha; s\rangle' \quad (\mu_{\alpha;s} \in \mathrm{Spec}(B))$$

を満たす同時固有ベクトルである．ここで，A のブロックは同一固有値に対応しているが，対応する B のブロックに B の同じ固有値が並ぶとは限らず，B の縮退した固有値がいくつかのブロックに分散して現れることがあることに注意せよ．

次に (2) を仮定する．A, B の同時固有ベクトルを $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \ldots, |v_n\rangle\}$ とし，これらを列ベクトルにもつ n 次正則行列を $P = \begin{pmatrix}|v_1\rangle & |v_2\rangle & \cdots & |v_n\rangle\end{pmatrix}$ とする．$P^{-1}AP = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, $P^{-1}BP = \mathrm{diag}(\mu_1, \ldots, \mu_n)$ と同時対角化できたとする．対角行列どうしは可換なので

$$O = (P^{-1}AP)(P^{-1}BP) - (P^{-1}BP)(P^{-1}AP) = P^{-1}[A, B]P$$

が成り立つ．左から P, 右から P^{-1} をかけることにより，$[A, B] = O$ が得られる．∎

定理 6.8 では，簡単のため A, B は対角化可能行列としたが，一般には A, B が可換であれば，同時三角化可能であることが知られている．

ここで，量子力学をすでに勉強した読者のために，本節で学んだ事実の例をあげる．角運動量演算子 $\{J_x, J_y, J_z\}$ は $[J_j, J_k] = i\sum_{\ell} \epsilon_{jk\ell} J_\ell$ を満たす．ここで $J^2 := J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ とおくと，J^2 は J_x, J_y, J_z の各々と可換である．特に可換な組 J^2 と J_z をとり，その同時固有ベクトルを $|j, m\rangle$ とおく．ただし $J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$, $J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle$ を満たす．ここに $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ および $-j \le m \le j$ である．ここで j を指定しても m は 1 つには決まらない．j が決まった一般の状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-j}^{j} c_m |j, m\rangle$$

で与えられる．逆に m が決まった状態は

$$|\phi\rangle = \sum_{j=m}^{\infty} b_j |j, m\rangle$$

で与えられ，j は決まらない．もっとも一般的な状態

$$|\chi\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^{j} c_{jm} |j, m\rangle$$

は，j も m も決まっていない．

7. 正規行列

エルミート行列やユニタリー行列は量子物理学で中心的な役割を果たし，その固有値問題は原理的にも応用においても重要である．これらは正規行列とよばれるよい行列のクラスを定める．正規行列は対角化可能であり，さらにそれはスペクトル分解により，固有値と射影演算子の線形結合で表すこともできて，数学や物理学のあらゆる分野で大変強力な武器となる．

7-1 正規行列の固有値問題

定義 7.1 正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ が，条件

$$AA^\dagger = A^\dagger A$$

を満たすとき，A は正規行列であるという．

例題 7.1 $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ が正規行列であることを確かめ，σ_x を対角化せよ．

解答： $\sigma_x^\dagger = \sigma_x$，$\sigma_x^2 = I_2$ より，$\sigma_x^\dagger \sigma_x = \sigma_x \sigma_x^\dagger = I_2$ となり，σ_x は正規行列である．

σ_x の固有値は $1, -1$ であり[1)]，対応する固有ベクトルは $|1\rangle = (1,1)^t$，$|-1\rangle = (1,-1)^t$ にとることができる．よって，$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ とおくと，$P^{-1}\sigma_x P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ とできる．固有ベクトルが互いに直交しているので，規格化して $|1\rangle =$

1） 定理 6.1 より，$\lambda_1 + \lambda_2 = \mathrm{tr}\,\sigma_x = 0$，$\lambda_1\lambda_2 = \det \sigma_x = -1$ なので，2 次の場合は固有値方程式を解かなくても固有値は暗算で求めることができる．

$(1,1)^t/\sqrt{2}$, $|-1\rangle = (1,-1)^t/\sqrt{2}$ にとってもよい．$Q = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ とおくと，

$$\sigma_x Q = \big(\sigma_x|1\rangle \quad \sigma_x|-1\rangle\big) = \big(|1\rangle \quad -|-1\rangle\big) = Q\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

となり，両辺に左から $Q^\dagger$ をかけることで，$Q^\dagger \sigma_x Q = \mathrm{diag}(1,-1)$ と対角化できる．

□

例題 7.1 では，異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交しており，固有ベクトルからなる $\mathbb{C}^2$ の正規直交基底をとることができた．これは正規行列に共通した性質である．これを証明していこう．

まず，物理学において中心的な役割を果たすエルミート行列やユニタリー行列が正規行列であること，そしてそれらの固有値の性質を調べよう．

命題 7.1 $A \in M(n;\mathbb{C})$ とする．

(1) エルミート行列 A は正規行列で，その固有値は実数である．

(2) 歪エルミート行列 A, すなわち $A^\dagger = -A$ を満たす行列は正規行列で，その固有値は 0 または純虚数である．

(3) ユニタリー行列 A は正規行列で，その固有値の絶対値は 1 である．

証明： (1) エルミート行列 A は $A^\dagger = A$ を満たすので，

$$AA^\dagger = A^2 = A^\dagger A$$

となり，A は正規行列である．また，$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ の両辺のエルミート共役は $\langle\lambda|A = \lambda^*\langle\lambda|$ となるので，

$$\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda|\lambda\rangle = \langle\lambda|A|\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda^*|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$$

が得られる．$\langle\lambda|\lambda\rangle \neq 0$ より，$\lambda = \lambda^*$, すなわち λ は実数である． ▮

問 7.1 命題 7.1 (2), (3) を証明せよ．

次に，正規行列の固有ベクトルの直交性を証明しよう．定理 6.3 は異なる固有値に属する固有ベクトルの「線形独立性」を主張していたが，次の定理 7.1 は，正規行列に対してさらに強い「直交性」を主張する．

定理 7.1　$A \in M(n;\mathbb{C})$ を正規行列とし，$\mathrm{Spec}(A) = \{\widetilde{\lambda}_1, \ldots, \widetilde{\lambda}_r\}$ とする．このとき，固有ベクトル $|\widetilde{\lambda}_1\rangle, \ldots, |\widetilde{\lambda}_r\rangle$ は互いに直交する．

証明：まず，$|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle$ が A, $A^\dagger$ の同時固有ベクトルであることを示そう．条件 $A|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle = \widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle$ $(\alpha = 1, 2, \ldots, r)$ と $AA^\dagger = A^\dagger A$ から

$$\begin{aligned}\|(A^\dagger - \widetilde{\lambda}_\alpha^* I_n)|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle\|^2 &= \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|(A - \widetilde{\lambda}_\alpha I_n)(A^\dagger - \widetilde{\lambda}_\alpha^* I_n)|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle \\ &= \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|(A^\dagger - \widetilde{\lambda}_\alpha^* I_n)(A - \widetilde{\lambda}_\alpha I_n)|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle = 0\end{aligned}$$

となるので，$(A^\dagger - \widetilde{\lambda}_\alpha^* I_n)|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle = \mathbf{0}$, すなわち $A^\dagger|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle = \widetilde{\lambda}_\alpha^*|\widetilde{\lambda}_\alpha\rangle$ が成り立つ．両辺のエルミート共役をとることにより，$\langle\widetilde{\lambda}_\alpha|A = \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha$ が成り立つ．

$\alpha \neq \beta$ のとき

$$\widetilde{\lambda}_\beta\langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|A|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = \langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = \widetilde{\lambda}_\alpha\langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle$$

より，$(\widetilde{\lambda}_\beta - \widetilde{\lambda}_\alpha)\langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = 0$ となる．$\widetilde{\lambda}_\beta \neq \widetilde{\lambda}_\alpha$ より，$\langle\widetilde{\lambda}_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta\rangle = 0$ が得られる．■

では，正規行列は必ず対角化可能であることを証明しよう．

定理 7.2　正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，次の 2 つの条件は同値である．

(1)　A は正規行列．

(2)　A はユニタリー行列で対角化可能．

証明：(2) を仮定する．$U \in \mathrm{U}(n)$ が存在して $U^\dagger AU$ が対角行列 B となるとする．このとき，$A = UBU^\dagger$, $A^\dagger = UB^\dagger U^\dagger$ となる．対角行列どうしは可換なので，

$$A^\dagger A = UB^\dagger U^\dagger UBU^\dagger = UB^\dagger BU^\dagger = UBB^\dagger U^\dagger = UBU^\dagger UB^\dagger U^\dagger = AA^\dagger$$

となり，(1) が得られた．

次に，(1) を仮定する．(2) を n に関する数学的帰納法で証明する．

$n = 1$ のとき，A は単位行列 $\begin{pmatrix}1\end{pmatrix}$ で対角化可能である．

$n \geq 2$ のとき，任意の $(n-1)$ 次正規行列 B はユニタリー行列で対角化可能であると仮定する．A をユニタリー行列 $U_1 \in \mathrm{U}(n)$ で三角化し，$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ と $\langle v| \in M(1, n-1;\mathbb{C})$, $C \in M(n-1;\mathbb{C})$ を用いて，$U_1^\dagger AU_1 = \begin{pmatrix}\lambda & \langle v| \\ \mathbf{0} & C\end{pmatrix}$ とブロック行列で表す．このとき，

$$A^\dagger A = U_1\begin{pmatrix}\lambda^* & \mathbf{0}^t \\ |v\rangle & C^\dagger\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda & \langle v| \\ \mathbf{0} & C\end{pmatrix}U_1^\dagger = U_1\begin{pmatrix}|\lambda|^2 & \lambda^*\langle v| \\ \lambda|v\rangle & |v\rangle\langle v| + C^\dagger C\end{pmatrix}U_1^\dagger,$$

$$AA^\dagger = U_1 \begin{pmatrix} \lambda & \langle v| \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda^* & \mathbf{0}^t \\ |v\rangle & C^\dagger \end{pmatrix} U_1^\dagger = U_1 \begin{pmatrix} |\lambda|^2 + \langle v|v\rangle & \langle v|C^\dagger \\ C|v\rangle & CC^\dagger \end{pmatrix} U_1^\dagger$$

となる．$AA^\dagger = A^\dagger A$ より，$\langle v|v\rangle = 0$, すなわち $\langle v| = \mathbf{0}^t$ が得られる．このとき，右下のブロック C は正規行列である．数学的帰納法の仮定により，$U'^\dagger CU'$ が対角行列 D' となるユニタリー行列 $U' \in \mathrm{U}(n-1)$ が存在する．$U_2 := (1) \oplus U'$, $U := U_1U_2$ とおくと，これらは n 次ユニタリー行列となり，

$$U^\dagger AU = U_2^\dagger \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{0}^t \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix} U_2 = \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{0}^t \\ \mathbf{0} & U'^\dagger CU' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{0}^t \\ \mathbf{0} & D' \end{pmatrix}$$

と対角行列になる[2)]． ∎

例題 7.2 次のエルミート行列をユニタリー行列で対角化せよ．

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

解答: A の固有値は $1, 1, 3$ であり, 対応する固有ベクトルは $|1;1\rangle = (0,1,0)^t$, $|1;2\rangle = (1,0,-i)^t$, $|3;1\rangle = (1,0,i)^t$ にとることができる．グラム–シュミットの正規直交化法により，$|1;1\rangle = (0,1,0)^t$, $|1;2\rangle = (1,0,-i)^t/\sqrt{2}$, $|3;1\rangle = (1,0,i)^t/\sqrt{2}$ にとり替える．このとき，$P = \big(|1;1\rangle \quad |1;2\rangle \quad |3;1\rangle\big) \in \mathrm{U}(3)$ とおくと，

$$AP = \Big(A|1;1\rangle \quad A|1;2\rangle \quad A|3;1\rangle\Big) = \Big(|1;1\rangle \quad |1;2\rangle \quad 3|3;1\rangle\Big) = P \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

となり，両辺に左から $P^\dagger$ をかけることにより，$P^\dagger AP = \mathrm{diag}(1,1,3)$ と対角化できる．

B は基底ベクトルの順を, 標準基底 $\{|e_1^0\rangle, |e_2^0\rangle, |e_3^0\rangle, |e_4^0\rangle\}$ から $\{|e_3^0\rangle, |e_2^0\rangle, |e_1^0\rangle, |e_4^0\rangle\}$ に変えると，行列は 1, 3 列目および 1, 3 行目を入れ替えることになり，ブロック対角行列 $I_2 \oplus \sigma_x$ にすることができる．例題 7.1 より，$I_2 \oplus \sigma_x$ の固有値は $1, 1, 1, -1$ であり，対応する固有ベクトルは $|1;1\rangle = (1,0,0,0)^t$, $|1;2\rangle = (0,1,0,0)^t$, $|1;3\rangle = (0,0,1,1)^t/\sqrt{2}$, $|-1;1\rangle = (0,0,1,-1)^t/\sqrt{2}$ にとることができる．よって，B の固有値は $1, 1, 1, -1$ であり，対応する固有ベクトルは再び基底の順番を入れ替えて $|1;1\rangle = (0,0,1,0)^t$, $|1;2\rangle = (0,1,0,0)^t$, $|1;3\rangle = (1,0,0,1)^t/\sqrt{2}$, $|-1;1\rangle = (0,0,1,-1)^t/\sqrt{2}$ にとることができる．このとき，

2) これは $\mathbb{C}^n$ の基底を固有ベクトルに変換したときの行列の変換 (5.1) を表す．

$$Q = \begin{pmatrix} |1;1\rangle & |1;2\rangle & |1;3\rangle & |-1;1\rangle \end{pmatrix} \in \mathrm{U}(4)$$

とおくと,

$$\begin{aligned} BQ &= \begin{pmatrix} B|1;1\rangle & B|1;2\rangle & B|1;3\rangle & B|-1;1\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} |1;1\rangle & |1;2\rangle & |1;3\rangle & -|-1;1\rangle \end{pmatrix} = Q\ \mathrm{diag}(1,1,1,-1) \end{aligned}$$

となり, 左から $Q^\dagger$ をかけることにより, $Q^\dagger BQ = \mathrm{diag}(1,1,1,-1)$ と対角化できる.

□

正規行列に対して, その固有値が縮退しているときには, グラム–シュミットの正規直交化法によってつねに固有ベクトルのみからなる $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底を構成することができる.

問 7.2　次の行列が正規行列であることを確かめ, ユニタリー行列を用いて対角化せよ.

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ 1-i & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 2i \\ 0 & 3 & 0 \\ -2i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

7-2　スペクトル分解

正規行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ の対角化では, 固有ベクトルからなる $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底を構成できた. これらが完全性関係 (4.3) を満たすことを, A の表示に反映させよう (5-2-2 項参照). 例えば, 例題 7.1 の σ_x では $|1\rangle = (1,1)^t/\sqrt{2}$, $|-1\rangle = (1,-1)^t/\sqrt{2}$ であり, 完全性関係

$$I_2 = |1\rangle\langle 1| + |-1\rangle\langle -1|$$

が成り立つ. この両辺に左から σ_x を作用させると

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sigma_x|1\rangle\langle 1| + \sigma_x|-1\rangle\langle -1| \\ &= |1\rangle\langle 1| - |-1\rangle\langle -1| = 1 \cdot \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + (-1) \cdot \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{7.1}$$

となり, σ_x を固有値と射影演算子の線形結合で表すことができる. これを行列のスペクトル分解という.

定理 7.3 正規行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，その固有ベクトルからなる $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底 $\{|\lambda_1\rangle, \ldots, |\lambda_n\rangle\}$ をとる．このとき，次の分解が成り立つ：

$$A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|.$$

証明： A は正規行列であるので，その固有ベクトルからなる $\mathbb{C}^n$ の正規直交基底 $\{|\lambda_1\rangle, \ldots, |\lambda_n\rangle\}$ は完全性関係 (4.3)

$$I_n = \sum_{j=1}^{n} |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|$$

を満たす．両辺に左から A を作用させると

$$A = AI_n = \sum_{j=1}^{n} A|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j| = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j|\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|$$

が得られる． ∎

A の固有値が縮退している場合を考えよう．$\mathrm{Spec}(A) = \{\widetilde{\lambda}_1, \ldots, \widetilde{\lambda}_r\}$ とし，$\{|\widetilde{\lambda}_\alpha; 1\rangle, \ldots, |\widetilde{\lambda}_\alpha; g_\alpha\rangle\}$ を $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ の正規直交基底にとる．$\mathbb{C}^n$ から $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ への射影演算子を

$$P_\alpha := \sum_{k=1}^{g_\alpha} |\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle\langle\widetilde{\lambda}_\alpha; k| \tag{7.2}$$

とするとき (4-4 節参照)，定理 7.3 は次のように表すこともできる：

$$A = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha \sum_{k=1}^{g_\alpha} |\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle\langle\widetilde{\lambda}_\alpha; k| = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha P_\alpha.$$

定理 7.3 はこのままでも十分強力であるが，次に固有ベクトルを求めずに射影演算子を求める方法を考えよう．そのため，唐突ではあるが，次の行列を考える：

$$Q_\alpha := \prod_{\substack{1\le\gamma\le r \\ \gamma\ne\alpha}} \frac{A - \widetilde{\lambda}_\gamma I_n}{\widetilde{\lambda}_\alpha - \widetilde{\lambda}_\gamma}. \tag{7.3}$$

この行列の各固有ベクトルへの作用を考えると，

$$Q_\alpha|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = \prod_{\gamma\ne\alpha} \frac{(\widetilde{\lambda}_\alpha - \widetilde{\lambda}_\gamma)I_n}{\widetilde{\lambda}_\alpha - \widetilde{\lambda}_\gamma}|\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle = |\widetilde{\lambda}_\alpha; k\rangle \quad (1 \le k \le g_\alpha),$$

$$Q_\alpha|\widetilde{\lambda}_\beta; k\rangle = \prod_{\gamma\ne\alpha} \frac{(\widetilde{\lambda}_\beta - \widetilde{\lambda}_\gamma)I_n}{\widetilde{\lambda}_\alpha - \widetilde{\lambda}_\gamma}|\widetilde{\lambda}_\beta; k\rangle = \mathbf{0} \quad (\beta \ne \alpha,\ 1 \le k \le g_\beta) \tag{7.4}$$

となる．(7.4) は，中項の分子において $\gamma\ (\neq \alpha)$ のいずれか 1 つが β に等しいため 0 となる．よって，Q_α は $\mathbb{C}^n$ から $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha}$ への射影演算子であり，P_α に等しいことがわかる．この方法は，規格化された固有ベクトルを求めるのが困難な場合や，固有ベクトルの具体形が必要ない場合に特に有用である．

例 7.1 $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$ のスペクトル分解を求めよう．A の固有値は $\widetilde{\lambda}_1 = 1, \widetilde{\lambda}_2 = 3$ なので，

$$A = 1 \cdot \frac{A - 3I_2}{1-3} + 3 \cdot \frac{A - I_2}{3-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

となる．例題 7.2 より，$|1;1\rangle = (0,1,0)^t$, $|1;2\rangle = (1,0,-i)^t/\sqrt{2}$, $|3;1\rangle = (1,0,i)^t/\sqrt{2}$ にとることができるので，

$$\begin{aligned} A &= (|1;1\rangle\langle 1;1| + |1;2\rangle\langle 1;2|) + 3|3;1\rangle\langle 3;1| \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となり，固有ベクトルを用いた場合と (7.3) を用いた場合は一致する．

スペクトル分解の重要な応用の一つが，行列の関数の計算である．

命題 7.2 $A \in M(n;\mathbb{C})$ を正規行列とする．このとき，

$$A^k = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha^k P_\alpha \quad (k = 1,2,3,\ldots) \tag{7.5}$$

が成り立つ．さらに A が正則でもあれば，(7.5) は任意の $k \in \mathbb{Z}$ に対して成り立つ．

証明： (6.2), (7.2) より，

$$A^k P_\alpha = \sum_{j=1}^{g_\alpha} A^k |\widetilde{\lambda}_\alpha; j\rangle\langle\widetilde{\lambda}_\alpha; j| = \sum_{j=1}^{g_\alpha} \widetilde{\lambda}_\alpha^k |\widetilde{\lambda}_\alpha; j\rangle\langle\widetilde{\lambda}_\alpha; j| = \widetilde{\lambda}_\alpha^k P_\alpha$$

となる．また，完全性関係より $\sum_{\alpha=1}^{r} P_\alpha = I_n$ となるので，A^k を左から作用させて

$$A^k = A^k I_n = A^k \sum_{\alpha=1}^{r} P_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{r} A^k P_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha^k P_\alpha$$

が得られる．

A が正則であれば，例題 6.1 より $\widetilde{\lambda}_\alpha \neq 0$ となるので，(7.5) は $k=0$ のとき完全性関係を意味している．また，A の固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ に属する固有ベクトル $|\widetilde{\lambda}_\alpha; j\rangle$ は A^{-1} の固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha^{-1}$ に属する固有ベクトルでもあるので，A^{-1} の $\mathbb{C}^n$ から $V_{\widetilde{\lambda}_\alpha^{-1}}$ への射影演算子は P_α である．よって，A^{-1} のスペクトル分解は

$$A^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha^{-1} P_\alpha$$

となり，これに前半の結果を適用すれば，(7.5) は任意の $k \in \mathbb{Z}$ に対して成り立つ．∎

正規行列 A と $t=0$ で解析的な関数[3] $f(t)$ に対して，行列の関数 $f(A)$ を

$$f(A) := \sum_{\alpha=1}^{r} f(\widetilde{\lambda}_\alpha) P_\alpha \tag{7.6}$$

で定義できる[4]．実際，f のマクローリン展開 $f(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} t^k$ に A を代入すると，命題 7.2 から

$$f(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} A^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha^k P_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{r} f(\widetilde{\lambda}_\alpha) P_\alpha$$

となる．A が正則行列でもあれば，$t=0$ でローラン展開可能な関数 $f(t)$ に対しても $f(A)$ を定義することもできる．

たとえ $f(t)$ が級数展開できないときでも，$f(A)$ に意味を与えることができる場合がある．例えば，$f(t) = \sqrt{t}$ にエルミート行列 σ_x を代入することを考える．(7.1) において $P_1 = |1\rangle\langle 1|$, $P_2 = |-1\rangle\langle -1|$ とおくと

$$B := (\pm 1) P_1 + (\pm i) P_2$$

のそれぞれは $B^2 = \sigma_x$ を満たす行列であり，この B を $\sqrt{\sigma_x}$ と考えることができる．符号の選び方から 4 つの行列が得られるが，これは実数の計算においても 2 乗して x になる数は $\pm\sqrt{x}$ の 2 通りあることと対応している．

---

3) マクローリン展開がもとの関数と一致する関数を $t=0$ で解析的であるという．t を複素変数とみなして $t=0$ の近傍で複素微分可能な関数は解析的である．一方，$f(t) = \exp(-1/t^2)$ $(t \neq 0)$, 0 $(t=0)$ は，$f^{(k)}(0) = 0$ $(k = 0, 1, \ldots)$ であり，マクローリン展開は $f(t) = 0$ となるので，これは $t=0$ で解析的ではない関数の例である．

4) A のすべての固有値が $f(t)$ のマクローリン展開の収束域にあるときに限る．

例題 7.3 $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$ の指数関数 e^{tA} (定義 3.1 参照) を行列要素を用いて表せ.

解答： 例 7.1 から A のスペクトル分解は $A = P_1 + 3P_2$ となるので，(7.6) より

$$e^{tA} = e^t P_1 + e^{3t} P_2$$

$$= e^t \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + e^{3t} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e^t + e^{3t}}{2} & 0 & \frac{i(e^t - e^{3t})}{2} \\ 0 & e^t & 0 \\ -\frac{i(e^t - e^{3t})}{2} & 0 & \frac{e^t + e^{3t}}{2} \end{pmatrix}$$

となる. □

例題 7.4 正規行列 $A \in M(n; \mathbb{C})$ に対して，スペクトル分解を用いてケーリー–ハミルトンの定理 (定理 6.7) を証明せよ.

解答： スペクトル分解 $A = \sum_{\alpha=1}^{r} \widetilde{\lambda}_\alpha P_\alpha$ を t の多項式である特性関数 $D_A(t)$ に代入すると，固有値 $\widetilde{\lambda}_\alpha$ は $D_A(t) = 0$ の解であるので，(7.6) より，

$$D_A(A) = \sum_{\alpha=1}^{r} D_A(\widetilde{\lambda}_\alpha) P_\alpha = O$$

となる. □

問 7.3 正規行列 $A \in M(2; \mathbb{C})$ の固有値が $-i, 2$ であり，対応する固有ベクトルが $|-i\rangle = (-1, i)^t/\sqrt{2}$, $|2\rangle = (1, i)^t/\sqrt{2}$ にとれたとする. このとき，A を求めよ.

問 7.4 $A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$，$B = \begin{pmatrix} 5 & -2 & -4 \\ -2 & 2 & 2 \\ -4 & 2 & 5 \end{pmatrix}$ とする.

(1) A, B の固有値と対応する規格化された固有ベクトルをそれぞれ求めよ.

(2) A, B のスペクトル分解をそれぞれ求めよ.

(3) $\exp(itA)$, $\exp(itB)$ を求めよ.

(4) (2) を用いて，A^{-1}, B^{-1} を求めよ.

次に，正規ではない対角化可能行列のスペクトル分解について述べる[5]. 対角化可能行列 $A \in M(n; \mathbb{C})$ に対して，固有ベクトルからなる (正規直交基底

5) じつは，本節の内容はすべて対角化可能行列に対して一般化される. 無限次行列のことを考えると，正規行列においてスペクトル分解を考えるのがよく，物理学では主に正規行列を扱うため，本書では，本章でスペクトル分解を扱った.

とは限らない) $\mathbb{C}^n$ の基底 $\{|\lambda_1\rangle, \ldots, |\lambda_n\rangle\}$ が存在する．これらを列ベクトルにもつ正則行列を P とし，P^{-1} の各行ベクトルを $(\lambda_1|, \ldots, (\lambda_n|$ とすると，定理 7.3 と同様にして

$$A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j |\lambda_j\rangle(\lambda_j|$$

が成り立つ．固有ベクトルを求めなくても，(7.3) で射影演算子を計算できることもわかる．スペクトル分解から行列の関数も計算できる．

例題 7.5 $A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix}$ のスペクトル分解と，指数関数 e^{tA} を求めよ．

解答： A の固有値は 1, 5 なので，A のスペクトル分解は

$$A = 1 \cdot \frac{A - 5I_3}{1-5} + 5\frac{A - I_3}{5-1} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} + 5\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

となる．(7.6) より，指数関数は

$$\begin{aligned} e^{tA} &= e^t \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} & -\frac{1}{2} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} + e^{5t}\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{e^{5t}+3e^t}{4} & \frac{e^{5t}-e^t}{2} & \frac{e^{5t}-e^t}{4} \\ \frac{e^{5t}-e^t}{4} & \frac{e^{5t}+e^t}{2} & \frac{e^{5t}-e^t}{4} \\ \frac{e^{5t}-e^t}{4} & \frac{e^{5t}-e^t}{2} & \frac{e^{5t}+3e^t}{4} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる．例題 6.3 と比較せよ． □

7-3 パウリ行列

本書のさまざまな例にすでに現れた 3 つの行列

$$\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

をパウリ行列という．これらは $\operatorname{tr}\sigma_x = \operatorname{tr}\sigma_y = \operatorname{tr}\sigma_z = 0$ を満たすエルミート行列である．$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の代わりに $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ と表すこともある．また，

単位行列 I_2 を σ_0 と表すこともある．

パウリ行列は物理や数学への応用において大変重要な行列である．本節ではこの後の応用を念頭にパウリ行列を含む重要な公式をいくつか紹介する．

パウリ行列は交換関係

$$[\sigma_j, \sigma_k] = \sigma_j\sigma_k - \sigma_k\sigma_j = 2i\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{jk\ell}\sigma_\ell \quad (1 \leq j, k \leq 3) \tag{7.7}$$

および反交換関係

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} := \sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk}I_2 \quad (1 \leq j, k \leq 3)$$

を満たす．$\epsilon_{jk\ell}$ は 3 次完全反対称テンソル (2.9) である．これらから

$$\sigma_j\sigma_k = i\sum_{\ell=1}^{3}\epsilon_{jk\ell}\sigma_\ell + \delta_{jk}I_2$$

が得られる．

一般に，$\tau_j \in M(2;\mathbb{C})$ $(j = 1, 2, 3)$ が交換関係 (7.7) を満たすとき，τ_1, τ_2, τ_3 をスピン行列という．τ_3 が対角行列となる基底を用いたときのスピン行列はパウリ行列となる．

σ_x, σ_y の固有値は 1, -1 であり，そのスペクトル分解は

$$\sigma_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

である．したがって，

$$\exp(it\sigma_x) = \begin{pmatrix} \cos t & i\sin t \\ i\sin t & \cos t \end{pmatrix}, \quad \exp(it\sigma_y) = \begin{pmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{pmatrix} \tag{7.8}$$

が得られる．

物理学の通常のカリキュラムでは，パウリ行列は量子力学においてスピン 1/2 の粒子，例えば，電子や陽子を扱うときに初めて目にするであろう．これらの粒子のスピン角運動量は σ_k を用いて $S_k = (\hbar/2)\sigma_k$ と表される．ここで，$\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割った自然定数である．以下断らない限り，$\hbar = 1$ となる単位系 (自然単位系) をとる．

パウリ行列 σ_z は対角行列であり，その 2 つの規格化された固有ベクトルを

$$|\uparrow\rangle := |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle := |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とおく．$|\uparrow\rangle$ はスピン角運動量が上向き，$|\downarrow\rangle$ は下向きの角運動量状態を表す[6)]．固有空間 V_1, V_{-1} への射影演算子はそれぞれ

$$P_\uparrow := |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_\downarrow := |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となる．

スピン昇降演算子 $\sigma_\pm$ を

$$\sigma_+ := \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle\langle\downarrow|,$$

$$\sigma_- := \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$$

で定義すると，次が成り立つ：

$$\sigma_+|\uparrow\rangle = \sigma_-|\downarrow\rangle = \mathbf{0}, \quad \sigma_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma_-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle.$$

問 7.5 次の等式を示せ：

$$P_\uparrow|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad P_\uparrow|\downarrow\rangle = \mathbf{0}, \quad P_\downarrow|\uparrow\rangle = \mathbf{0}, \quad P_\downarrow|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$
$$\sigma_\pm^2 = O, \quad P_\uparrow^2 = P_\uparrow, \quad P_\downarrow^2 = P_\downarrow, \quad P_\uparrow P_\downarrow = P_\downarrow P_\uparrow = O.$$

2 次エルミート行列 A は一般的に

$$c_0\sigma_0 + c_x\sigma_x + c_y\sigma_y + c_z\sigma_z \quad (c_0,\, c_x,\, c_y,\, c_z \in \mathbb{R})$$

と表される．実際，$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$ がエルミート行列であれば，A_{11}, $A_{22} \in \mathbb{R}$, $A_{21} = A_{12}^*$ であり，

$$c_0 = \frac{A_{11} + A_{22}}{2},$$

$$c_x = \frac{A_{12} + A_{21}}{2}, \quad c_y = \frac{-A_{12} + A_{21}}{2i}, \quad c_z = \frac{A_{11} - A_{22}}{2}$$

---

6) 第 II 部で学ぶ量子情報では，$|\uparrow\rangle$ を $|0\rangle$, $|\downarrow\rangle$ を $|1\rangle$ で表すことがある．

とすればよい．

エルミート行列 $H \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，e^{iH} はユニタリー行列になる．実際，

$$e^{iH}(e^{iH})^\dagger = e^{iH}e^{-iH^\dagger} = e^{iH}e^{-iH} = I_n$$

となる．逆に，e^{iH} がユニタリー行列であれば，$H \in M(n;\mathbb{C})$ はエルミート行列である．$n=2$ とすれば，2 次ユニタリー行列 U は一般的に

$$\exp\{i(c_0\sigma_0 + c_x\sigma_x + c_y\sigma_y + c_z\sigma_z)\} \quad (c_0,\ c_x,\ c_y,\ c_z \in \mathbb{R})$$

と表されることがわかる．(7.8) を一般化しよう．

命題 7.3 $\widehat{\boldsymbol{n}} = (n_x, n_y, n_z)^t \in \mathbb{R}^3$ を実空間の単位ベクトル，パウリ行列を成分とするベクトルを $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^t$ で表し，$\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z$ とおく．このとき，

$$\exp(it\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = (\cos t)I_2 + i(\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sin t \quad (t \in \mathbb{R}) \tag{7.9}$$

が成り立つ．

証明： $\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ は固有値 ± 1 をもち，そのスペクトル分解は

$$\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \frac{\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}+I}{2} - \frac{\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}-I}{-2}$$

である．(7.6) より，その指数関数は

$$\begin{aligned}\exp(it\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= e^{it}\frac{\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}+I}{2} + e^{-it}\frac{\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}-I}{-2} \\ &= \frac{e^{it}+e^{-it}}{2}I + \frac{e^{it}-e^{-it}}{2}\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} = (\cos t)I_2 + i(\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sin t\end{aligned}$$

となる． ∎

7-4 準位反発

量子力学の興味深い現象に準位反発がある．それは，対称行列またはエルミート行列が 1 個の実パラメータを含むとき，それを変化させても固有値が縮退することはない，というものである．パラメータを変化させると，ある 2 つの固有値がぶつかるかのように振る舞うが，ぶつかる直前に反発して回

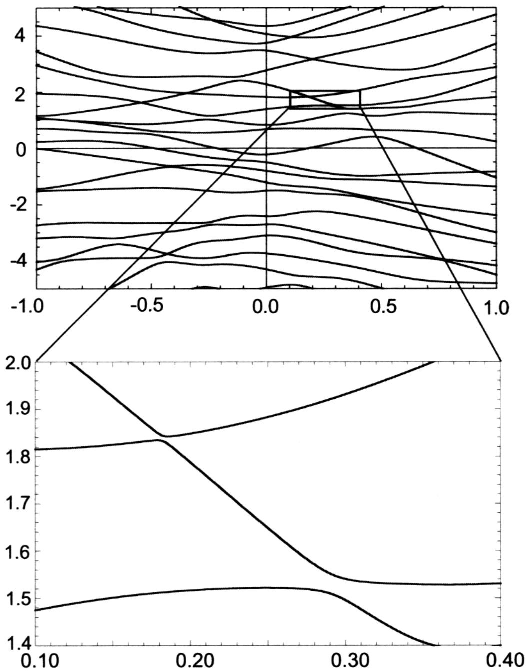


図 7.1　32 次の実対称行列 $A+tB$ $(-1 \le t \le 1)$ の固有値とその拡大図．横軸は t，縦軸は固有値の値である．

避行動をとるのである．図 7.1 は，対称行列 $A, B \in M(32; \mathbb{R})$ をランダムに選び，t をパラメータとして行列 $A+tB$ の固有値をプロットしたものである．長方形で囲んだ領域には準位が交差しているように見える点が 2 つあるが，拡大してみると準位反発が起こっていることがわかる．このように，1 個の実パラメータを変化させても固有値が縮退することは「まず起こらない」のである．

まず，具体的に式を用いて解析できる 2 次実対称行列の場合を考えよう．

例 7.2

$$A = \begin{pmatrix} a & c \\ c & b \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} d & f \\ f & e \end{pmatrix}, \quad A+tB = \begin{pmatrix} a+td & c+f \\ c+f & b+te \end{pmatrix}$$

とする．行列 $A+tB$ の固有値は

$$\frac{1}{2}\Big[a+b+(d+e)t$$
$$\pm\sqrt{\{(d-e)^2+4f^2\}t^2+2\{(a-b)(d-e)+4cf\}t+\{(a-b)^2+4c^2\}}\Big]$$

である．この 2 つの固有値が縮退するための必要十分条件は

$$\{(d-e)^2+4f^2\}t^2+2\{(a-b)(d-e)+4cf\}t+\{(a-b)^2+4c^2\}=0$$

である．$(d-e)^2+4f^2\neq 0$ のとき，この t についての 2 次方程式の判別式は

$$-4[(d-e)c+(b-a)f]^2$$

であるので，$(d-e)^2+4f^2\neq 0$ かつ $(d-e)c+(b-a)f\neq 0$ のとき，$A+tB$ の 2 つの固有値はどんなに t を動かしても縮退することはない．それ以外のとき，すなわち A, B がともに対角行列であるか，$(d-e)^2+4f^2\neq 0$ かつ $(d-e)c+(b-a)f=0$ のとき，$A+tB$ の 2 つの固有値が縮退する t が存在するが，a, b, c, d, e, f をランダムに選ぶとき，そのような確率は 0 である[7)]．したがって，2 次実対称行列 $A, B\in M(2;\mathbb{R})$ をランダムに選ぶとき，$A+tB$ $(t\in\mathbb{R})$ の固有値が縮退する確率は 0, すなわち準位反発が生じる．

これは次のように考えることもできる．2 次実対称行列を指定するには 3 個の実パラメータが必要であり，その全体は $\mathbb{R}^3$ と同一視される．一方で，2 次実対称行列の固有値が縮退するのは単位行列のスカラー倍のときのみであり，その全体は $\mathbb{R}^3$ 内で $\mathbb{R}$ と同一視されて曲線 C を描く．さて，$M(t):=A+tB$ $(t\in\mathbb{R})$ は $\mathbb{R}^3$ 内で t をパラメータとする直線を描く．$\mathbb{R}^3$ 内でランダムにとった直線が曲線 C と交わる確率は 0 であり[8)]，これは $M(t)$ の固有値が縮退する確率が 0 である，すなわち準位反発を意味する．

一般の n 次実対称行列の固有値を具体的に求めて準位反発を導くことは難しい．そこで，例 7.2 の後半で行った幾何学的考察を一般化して準位反発を

7) 「測度の意味で確率 0」であり，絶対に起こりえないことを意味しているわけではない．

8) $\mathbb{R}^3$ 内で異なる 2 つの平面は平行でない限り必ず交わる．しかし，2 つの直線は一般にはねじれの位置にあり，まず交わらない．このように，2 つの図形の次元の和が全空間の次元よりも小さい場合，2 つの図形が交わることはほとんど起こらず，「測度の意味で確率 0」となる．

導こう.

まず，n 次実対称行列を指定するには，上三角部分の行列要素を指定すればよく，$N := n + n(n-1)/2 = n(n+1)/2$ 個の実パラメータが必要であり，その全体は $\mathbb{R}^N$ と同一視される．これは，固有値と固有ベクトルを用いて，次のように考えることもできる．n 次実対称行列 A は，そのスペクトル分解

$$A = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|$$

によって，n 個の実固有値と，各固有値 λ_j に属する固有ベクトル $|\lambda_j\rangle$ を指定することで定まる．異なる固有値に属する固有ベクトルは直交することに注意されたい．λ_1 に属する固有ベクトル $|\lambda_1\rangle$ は $\mathbb{R}^n$ のある方向，すなわち $(n-1)$ 次元単位球上の点で指定され，極座標を使って $(n-1)$ 個のパラメータで記述される[9)]．次に λ_2 に属する固有ベクトル $|\lambda_2\rangle$ は，$|\lambda_1\rangle$ と直交するように，直交超平面内の $(n-2)$ 次元単位球面上の点で指定され，$(n-2)$ 個のパラメータで記述される．これを繰り返すと，n 個の固有ベクトルを指定するには，$(n-1)+(n-2)+\cdots+1 = n(n-1)/2$ 個のパラメータが必要になる．したがって，n 次実対称行列 A を指定するには，$n+n(n-1)/2 = n(n+1)/2 = N$ 個の実パラメータが必要であることがわかる．

では，固有値が縮退している n 次実対称行列全体の集合は $\mathbb{R}^N$ の中でどのような部分集合であろうか．2 つの固有値が縮退し，$\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ となる場合を考えよう．このとき，λ に属する固有ベクトル $|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle$ は $\mathbb{R}^n$ 内で 2 次元の平面を張る．この平面を指定するには，$|\lambda_1\rangle$ を指定するために $(n-1)$ 個のパラメータが，$|\lambda_2\rangle$ を指定するために $(n-2)$ 個のパラメータが必要であるが，これらのベクトルを平面内で回転させても同じ平面を張るので，回転角のパラメータ 1 個分は引いて考える．したがって，平面を指定するには $(n-1)+(n-2)-1 = (2n-4)$ 個のパラメータが必要である．残りの固有ベクトルを指定するには $(n-3)+(n-4)+\cdots+1 =$

---

9) $(n-1)$ 次元単位球面上の 2 点 $|\lambda_1\rangle, -|\lambda_1\rangle$ を区別することに意味はないので，厳密には球においてこれら対蹠点を同一視した射影空間とよばれる空間上の点を考える．ただし，射影演算子を定義するうえでこの差は重要ではないので，ここではこの違いは無視する．

$(n-2)(n-3)/2$ 個のパラメータが必要であり，固有値 $(n-1)$ 個のパラメータを足すと，少なくとも 2 つの固有値が縮退している実対称行列を指定するには，$2n-4+(n-2)(n-3)/2+(n-1)=n(n+1)/2-2=(N-2)$ 個の実パラメータが必要であることがわかる．したがって，その全体の集合は $\mathbb{R}^N$ 内で，$\mathbb{R}^{N-2}$ と同一視される曲面を描く[10]．

$M(t) := A+tB$ $(t\in\mathbb{R})$ は $\mathbb{R}^N$ 内で t をパラメータとする直線を描く．$\mathbb{R}^N$ でランダムにとった直線が $(N-2)$ 次元の曲面と交差する確率は 0 である．これは $M(t)$ の固有値が 2 重縮退する確率が 0, すなわち準位反発を意味する．縮退度が大きくなれば，曲面の次元は小さくなり，$M(t)$ と交わる可能性はますます小さくなる．

問 7.6 Mathematica や MATLAB などのソフトを用いて，適当な次数のランダムな実対称行列 A, B を生成し，図 7.1 と同様の固有値の図と，その見かけ上交差しているように見える点のまわりにおける拡大図を作成し，準位反発が起きていることを確認せよ．

次に，エルミート行列に対して同様の解析を行おう．エルミート行列 $A\in M(n;\mathbb{C})$ は $A=A^\dagger$ を満たすので，独立なパラメータは，対角要素 A_{ii} に n 個の実数，上半三角要素 A_{ij} $(i>j)$ に $n(n-1)/2$ 個の複素数があり，実パラメータの個数は $N:=n+2n(n-1)/2=n^2$ となる．これは n 個の実固有値と，$\mathbb{C}^n$ の正規直交基底を指定することでエルミート行列が定まることから考えてもよい．少なくとも 2 つの固有値が縮退しているエルミート行列を指定する場合も，実対称行列と同様に考察すれば，$(n-1)+2(2n-4)+2(n-3)+2(n-4)+\cdots+2=n^2-3=(N-3)$ 個の実パラメータが必要であることがわかる．したがって，エルミート行列全体の集合は $\mathbb{R}^N$ と同一視され，そのうち 2 つの固有値が縮退しているもの全体の集合は $\mathbb{R}^N$ 内で，$\mathbb{R}^{N-3}$ と同一視される曲面を描く．

$M(t) := A+tB$ $(t\in\mathbb{R})$ は $\mathbb{R}^N$ 内で t をパラメータとする直線を描く．$\mathbb{R}^N$ でランダムにとった直線が $(N-3)$ 次元の曲面と交差する確率は 0 である．これは $M(t)$ の固有値が 2 重縮退する確率が 0, すなわち準位反発を

10) 厳密には $(N-2)$ 次元の「代数的集合」であるが，簡単のため曲面とよぶことにする．

意味する．縮退度が大きくなれば，曲面の次元は小さくなり，$M(t)$ と交わる可能性はますます小さくなる．

問 7.7 問 7.6 と同様に，適当な次数のランダムなエルミート行列 A, B を生成し，準位反発が起きていることを具体的に確認せよ．

7-5 数 域

行列をある意味で可視化する方法の一つに，数域 (または値域) がある．数域は応用数学や工学においても重要な役割を果たす．

定義 7.2 正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，$\mathbb{C}$ の部分集合

$$W(A) := \{\langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{C} \mid |\psi\rangle \in \mathbb{C}^n,\ \langle\psi|\psi\rangle = 1\}$$
$$= \left\{ \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \in \mathbb{C} \;\middle|\; |\psi\rangle \in \mathbb{C}^n,\ |\psi\rangle \neq \mathbf{0} \right\} \tag{7.10}$$

を A の数域という．原点 $0 \in \mathbb{C}$ からもっとも離れた数域の点 z の絶対値

$$\max\{|z| \in \mathbb{R} \mid z \in W(A)\} \tag{7.11}$$

を数域半径という．

例 7.3 ユニタリー行列

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.12}$$

の数域を求めよう．U の固有値は $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = i$, $\lambda_3 = -1$, $\lambda_4 = -i$ であり，対応する規格化された固有ベクトルは

$$|\lambda_1\rangle = (\sqrt{2}+1, 1, 1, \sqrt{2}-1)^t/2\sqrt{2},$$

$$|\lambda_2\rangle = (-1, 1+\sqrt{2}i, 1-\sqrt{2}i, 1)^t/2\sqrt{2},$$

$$|\lambda_3\rangle = (\sqrt{2}-1, -1, -1, \sqrt{2}+1)^t/2\sqrt{2},$$

$$|\lambda_4\rangle = (-1, 1-\sqrt{2}i, 1+\sqrt{2}i, 1)^t/2\sqrt{2}$$

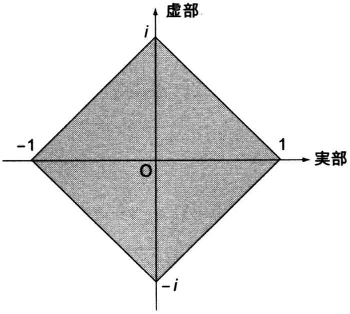


図 7.2　ユニタリー行列 (7.12) の数域. U の固有値は $1, i, -1, -i$ である.

にとることができる. $\mathbb{C}^4$ の単位ベクトルを

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{4} c_j |\lambda_j\rangle \quad (|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 = 1)$$

と展開すると,

$$\langle\psi|U|\psi\rangle = |c_1|^2 + i|c_2|^2 - |c_3|^2 - i|c_4|^2$$

となる. $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 = 1$ なので, U の数域 $W(U)$ は固有値 $1, i, -1, -i$ を頂点とする正方形の境界および内部を表す (図 7.2). また, U の数域半径は 1 である.

例 7.4　エルミート行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

の数域を求めよう. A の固有値は $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = 3$ であり, 対応する規格化された固有ベクトルは

$$|\lambda_1\rangle = (0, 1, 0)^t, \quad |\lambda_2\rangle = (1, 0, -i)^t/\sqrt{2}, \quad |\lambda_3\rangle = (1, 0, i)^t/\sqrt{2}$$

にとることができる (例題 7.2 参照). $\mathbb{C}^3$ の単位ベクトルを

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{3} c_j |\lambda_j\rangle \quad (|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1)$$

と展開すると，

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda_1|c_1|^2 + \lambda_2|c_2|^2 + \lambda_3|c_3|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 + 3|c_3|^2$$

となる．ここで，

$$1 = \lambda_{\min} = \sum_{j=1}^{3} |c_j|^2\lambda_{\min} \le \sum_{j=1}^{3} \lambda_j|c_j|^2 \le \sum_{j=1}^{3} \lambda_{\max}|c_j|^2 = \lambda_{\max} = 3$$

が成り立つので，A の数域 $W(A)$ は実軸上の閉区間 $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] = [1,3]$ となる．また，A の数域半径は 3 である．

一般に，正規行列の数域は $\mathbb{C}$ 内でその固有値を頂点とする多角形の周および内点であることがわかる．特に，エルミート行列の固有値は実数なので，数域の頂点は実軸上に並び，多角形が「つぶれて」，その数域は $\mathbb{R}$ 内の閉区間となる．同様に，2 次正規行列 $A \in M(2;\mathbb{C})$ の数域は，2 つの固有値を結ぶ線分となる．このように，スペクトル分解を用いることにより，正規行列の数域は固有値を用いて記述される．行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，A の固有値の絶対値の最大値

$$\rho(A) := \max\{|\lambda| \in \mathbb{R} \mid \lambda \in \mathrm{Spec}(A)\} \tag{7.13}$$

を A のスペクトル半径という．正規行列の数域半径はスペクトル半径に等しい．

正規行列でない行列の数域を求めよう．

例 7.5 行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & i \end{pmatrix} \in M(2;\mathbb{C})$ の数域を求めよう．$\mathbb{C}^2$ の単位ベクトルは一般的に

$$|\psi\rangle = e^{i\alpha}\left(\cos\theta, e^{i\beta}\sin\theta\right)^t \quad \left(-\frac{\pi}{2} \le \theta \le \frac{\pi}{2},\ 0 \le \beta \le \pi\right)$$

と表されるので

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle &= 2\cos^2\theta + (3e^{i\beta} + e^{-i\beta})\cos\theta\sin\theta + i\sin^2\theta \\ &= 2\cos^2\theta + 2\cos\beta\sin 2\theta + i(\sin^2\theta + \sin\beta\sin 2\theta)\end{aligned}$$

となる．結果は全体の位相 α に依存しないことに注意されたい．よって，A

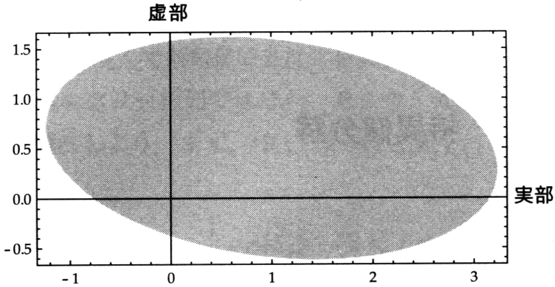


図 7.3　例 7.5 の A の数域

の数域 $W(A)$ を図示すると図 7.3 のようになる．図 7.3 から，A の数域半径は約 3.25 であることがわかる．

一方，A の固有値は

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}((1+i) + \sqrt{24-2i}), \quad \lambda_2 = \frac{1}{2}((1+i) - \sqrt{24-2i})$$

であり，それぞれの絶対値は $|\lambda_1| \sim 2.98$, $|\lambda_2| \sim 2.04$ である．よって，A のスペクトル半径は $|\lambda_1| \sim 2.98$ である．

例 7.5 のように，一般の行列の数域は複素平面 $\mathbb{C}$ 内の凸集合[11)]になることが知られている．一般に，スペクトル半径と数域半径は一致するとは限らない．

問 7.8　$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ とする．

(1)　A の数域が $(1,0)$ を中心とする半径 $1/2$ の円板であることを示せ．

(2)　A のスペクトル半径と数域半径を求めよ．

11) 平面で凸多角形を描くとわかるように，凸多角形中の 2 点 x, y をとると，それらを $t : 1-t$ に内分する点 $tx + (1-t)y$ もその多角形の内部の点である．ただし，$0 \leq t \leq 1$ である．これから，ある集合 S が与えられたときに任意の 2 点 $x, y \in S$ に対し，$tx + (1-t)y \in S$ である集合を凸集合という．

8. 特異値分解

正規行列の対角化を応用すると，対角化可能でない正方行列や一般の長方形行列に対して，対角化の類似である特異値分解を得ることができる．特異値分解は，画像処理やデータ検索，データ復元などの工学にも応用される．

8-1 特異値分解

$A \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，$A^\dagger A \in M(n;\mathbb{C})$ はエルミート行列になるので，ユニタリー行列を用いて対角化できる (定理 7.2 参照)．これを利用して，A の対角化の類似を考えよう．

$m > n$ の場合を考える．まず，$A^\dagger A$ の固有値 $\lambda \in \mathbb{R}$ に対して，対応する規格化された固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ とすると，

$$\|A|\lambda\rangle\|^2 = \langle\lambda|A^\dagger A|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda \geq 0 \tag{8.1}$$

となり，$\lambda \geq 0$ を満たすことがわかる．$A^\dagger A$ の固有値を大きな順に並べ

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0 = \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n$$

とする．r は正の固有値の個数であり，固有値 0 の縮退度は $n-r$ である．このとき，$\mathbb{C}^n$ には $A^\dagger A$ の固有ベクトルからなる正規直交基底 $\{|\lambda_1\rangle, \ldots, |\lambda_n\rangle\}$ が存在する．これらを列ベクトルにもつユニタリー行列を $V \in \mathrm{U}(n)$ とすると，

$$\begin{aligned} V^\dagger A^\dagger AV &= \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r, 0, \ldots, 0) \\ &= \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r) \oplus O_{n-r} \end{aligned} \tag{8.2}$$

が得られる．

ここで, (8.2) の $V^\dagger A^\dagger = (AV)^\dagger$ がユニタリー行列であれば, A をユニタリー行列 $(AV)^\dagger$ と V ではさんで対角化できたことになるが, $(AV)^\dagger \in M(m,n;\mathbb{C})$ であり，これはユニタリー行列ではない．そこで，AV を変形して m 次ユニタリー行列を構成しよう．まず，(8.1) より，$A|\lambda_j\rangle$ $(j=1,2,\ldots,r)$ を規格化し，

$$|\mu_j\rangle := \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} A|\lambda_j\rangle \quad (1 \le j \le r)$$

とおく．(8.2) より，$\{|\mu_1\rangle, \ldots, |\mu_r\rangle\}$ は $\mathbb{C}^m$ の正規直交系となるので，適当に $|\mu_{r+1}\rangle, \ldots, |\mu_m\rangle$ を付け加えて，$\mathbb{C}^m$ の正規直交基底 $\{|\mu_1\rangle, \ldots, |\mu_m\rangle\}$ をつくる．これらを列ベクトルにもつユニタリー行列を $U \in \mathrm{U}(m)$ とする．このとき，

$$U^\dagger AV = \mathrm{diag}\left(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}\right) \oplus O_{m-r,n-r} \in M(m,n;\mathbb{C}) \tag{8.3}$$

となる．実際，(8.2) より，$U^\dagger AV$ の (j,k) 行列要素は

$$\langle\mu_j|A|\lambda_k\rangle = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{\lambda_j}}\langle\lambda_j|A^\dagger A|\lambda_k\rangle = \sqrt{\lambda_j}\delta_{jk} & (1 \le j,k \le r), \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases}$$

である．したがって，A を 2 つのユニタリー行列 $U^\dagger, V$ ではさんで対角化することができた.

問 8.1　$m \le n$ の場合に，同様の対角化が得られることを示せ.

(8.3) を A について解くことで，次の定理が得られた.

定理 8.1　行列 $A \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，エルミート行列 $A^\dagger A$ の非零固有値を $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ とする．このとき, ユニタリー行列 $U \in \mathrm{U}(m)$, $V \in \mathrm{U}(n)$ が存在して,

$$A = U\Sigma V^\dagger, \tag{8.4}$$

$$\Sigma := \mathrm{diag}\left(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}\right) \oplus O_{m-r,n-r} \in M(m,n;\mathbb{C}) \tag{8.5}$$

と分解できる.

定義 8.1 行列 $A \in M(m,n;\mathbb{C})$ に対して，エルミート行列 $A^\dagger A$ の非零固有値の正の平方根 $\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}$ を A の特異値，(8.5) で定まる Σ を特異値行列，(8.4) を A の特異値分解 (**SVD** (Singular Value Decomposition)) という．

例題 8.1 次の行列の SVD を求めよ．

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ i & i \end{pmatrix}$$

解答： $A^\dagger A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ は対角化されている．固有値は $1, 0$ であり，対応する規格化された固有ベクトルは $|1\rangle = (1,0)^t$, $|0\rangle = (0,1)^t$ にとることができる．A の特異値は 1 である．したがって，

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad V = I_2$$

とおけば，A の特異値分解 $A = U\Sigma V^\dagger$ が得られる．

次に，$B^\dagger B = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$ の固有値は $4, 0$ であり，対応する規格化された固有ベクトルは $|4\rangle = (1,1)^t/\sqrt{2}$, $|0\rangle = (-1,1)^t/\sqrt{2}$ にとることができる．A の特異値は 2 である．

$$|\mu_1\rangle = \frac{1}{2} B|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,i)^t$$

とおく．$|\mu_1\rangle$ を含む $\mathbb{C}^3$ の正規直交基底として，例えば $|\mu_2\rangle = (0,1,0)^t$, $|\mu_3\rangle = (1,0,-i)^t/\sqrt{2}$ をとる．したがって，

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ i & 0 & -i \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

とおけば，B の特異値分解 $B = U\Sigma V^\dagger$ が得られる． □

例題 8.1 において A は対角化可能ではなく，B は正方行列でさえない．このように対角化できない行列に対しても，特異値分解を行うことができ，行列の情報の本質をとり出すことができるのである．

問 8.2 次の行列の SVD を求めよ.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

8-2 特異値分解の応用

8-2-1 特異値と階数

$A \in M(m, n; \mathbb{C})$ の特異値分解 $A = U\Sigma V^\dagger$ と A の階数 $\operatorname{rank} A$ の関係について考えよう．A の特異値の個数を r とする．両側のユニタリー行列 U, V は正則なので，行および列の基本操作で単位行列に変形することができる．したがって，

$$\operatorname{rank} A = \operatorname{rank} \Sigma = r$$

が得られる.

これは次のように幾何的に考えてもよい．ユニタリー行列 U, V の作用はそれぞれ $\mathbb{C}^m, \mathbb{C}^n$ の基底の回転を表し，それぞれの階数は m, n である．一方，特異値行列 Σ は $\mathbb{C}^n$ を $\mathbb{C}^r$ に写像する．したがって，A の $\mathbb{C}^n$ への作用を考えると，まず $V^\dagger$ によって，$\mathbb{C}^n$ は基底が回転されて $\mathbb{C}^n$ 全体に写像され，その後 Σ によって $\mathbb{C}^r$ に写像される．最後に U によって，$\mathbb{C}^r$ の基底が回転されて $\mathbb{C}^r$ に写像される．したがって，$\operatorname{rank} A = r$ となる.

例えば，例題 8.1 で扱った行列 A, B の階数はともに 1 であり，それぞれの特異値の個数と一致している.

問 8.3 $A = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \sqrt{2} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ の SVD を求め，$\operatorname{rank} A$ を求めよ.

8-2-2 偽 逆 行 列

正則行列でない，さらには正方行列とも限らない一般の行列 $A \in M(m, n; \mathbb{C})$ に対して，逆行列の類似行列を構成しよう．A の特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ とする．特異値行列を

$$\Sigma = \mathrm{diag}\left(\sqrt{\lambda_1},\ \sqrt{\lambda_2},\ \ldots,\ \sqrt{\lambda_r}\right) \oplus O_{m-r,n-r} \in M(m,n;\mathbb{C})$$

とするとき，

$$\Sigma' := \mathrm{diag}\left(\frac{1}{\sqrt{\lambda_1}},\ \frac{1}{\sqrt{\lambda_2}},\ \ldots,\ \frac{1}{\sqrt{\lambda_r}}\right) \oplus O_{n-r,m-r} \in M(n,m;\mathbb{C}) \tag{8.6}$$

とおく．このとき，

$$\Sigma\Sigma' = I_r \oplus O_{m-r}, \quad \Sigma'\Sigma = I_r \oplus O_{n-r} \tag{8.7}$$

が成り立つ．そこで，A の偽逆行列を

$$\overline{A} := V\Sigma' U^\dagger \in M(n,m;\mathbb{C})$$

で定義する．このとき，$A\overline{A} = I_r \oplus O_{m-r}$, $\overline{A}A = I_r \oplus O_{n-r}$ とはならないが，

$$\overline{A}A\overline{A} = (V\Sigma' U^\dagger)(U\Sigma V^\dagger)(V\Sigma' U^\dagger) = V\Sigma'(I_r \oplus O_{m-r})U^\dagger = V\Sigma' U^\dagger = \overline{A},$$

$$A\overline{A}A = (U\Sigma V^\dagger)(V\Sigma' U^\dagger)(U\Sigma V^\dagger) = U\Sigma(I_r \oplus O_{n-r})V^\dagger = U\Sigma V^\dagger = A$$

が成り立ち，$\overline{A}$ は逆行列に似た性質をもつ．(8.6) における $O_{n-r,m-r}$ は任意の $(n-r)\times(m-r)$ 行列にとり替えても (8.7) が成り立つが，(8.6) がもっとも簡単である．

例 8.1 例題 8.1 の A, B の偽逆行列を求めよう．

A の特異値行列は $\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ なので，$\Sigma' = \Sigma$ であり，$\overline{A} = A$ となる．

B の特異値行列は $\Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ なので，$\Sigma' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ とおくと，

$$\overline{B} = V\Sigma' U^\dagger = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 1 & 0 & -i \end{pmatrix}$$

となる．

$$\overline{B}B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B\overline{B} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

となり，これだけでは単位行列に近いとはいえないが，$B\overline{B}B = B$, $\overline{B}B\overline{B} = \overline{B}$ が成り立つので，$\overline{B}$ は B の逆行列のように振る舞う．

問 8.4 問 8.2 の A, B に対して，その偽逆行列 $\overline{A}$, $\overline{B}$ を求めよ．

8-2-3 簡約化された特異値分解とデータ圧縮

次数は大きいが階数は低い行列を，より少ない行列要素で表そう．そのために，まず特異値分解の簡約化を考える．$A \in M(m, n; \mathbb{C})$ の特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ とする．特異値行列を

$$\Sigma = \operatorname{diag}\left(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}\right) \oplus O_{m-r,n-r}$$

とする．Σ のうち重要なのは特異値を含む左上の r 次正方行列の部分

$$\widehat{\Sigma} = \operatorname{diag}\left(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}\right) \in M(r; \mathbb{C})$$

だけであり，それ以外は不要な情報と思える．そこで $\widehat{\Sigma}$ に対応して，U, V のはじめの r 列のみをとり出し

$$\widehat{U} := \begin{pmatrix} |\mu_1\rangle & |\mu_2\rangle & \cdots & |\mu_r\rangle \end{pmatrix} \in M(m, r; \mathbb{C}),$$
$$\widehat{V} := \begin{pmatrix} |\lambda_1\rangle & |\lambda_2\rangle & \cdots & |\lambda_r\rangle \end{pmatrix} \in M(n, r; \mathbb{C})$$

とおく．このとき，

$$A = \widehat{U}\widehat{\Sigma}\widehat{V}^\dagger$$

が成り立つ．これを簡約化された特異値分解という．U, V をユニタリー行列にとることをあきらめ，扱う行列要素の個数を大幅に削減したにもかかわらず，その積は A のままであり，削減によって失われた情報はない．

例 8.2 例題 8.1 の行列 B を簡約化しよう．

$$\widehat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ i \end{pmatrix}, \quad \widehat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2 \end{pmatrix}, \quad \widehat{V} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とおけば，$B = \widehat{U}\widehat{\Sigma}\widehat{V}^\dagger$ が再現される．

簡約化された特異値分解によって，どの程度効率よく行列の情報を表すことができるか考えよう．$A \in M(m,n;\mathbb{C})$ の行列要素は全部で mn 個ある．A の階数が r であることがわかれば，簡約化された特異値分解によって，A は $(mr+r+rn)$ 個の行列要素で再現できる．これは階数 r が行列の次数 m,n に比べて小さければ小さいほど再現効率がよい．例えば，$m=n=1000$, $r=10$ とすると，

$$\frac{mr+r+rn}{mn} = \frac{20010}{10^6} \simeq 0.02$$

であり，A の情報を 1 つも失うことなく，扱う行列要素の個数を 1/50 に圧縮することができる．

また，A の r 個の特異値のうち他の特異値と比べて際立って大きな特異値が k 個あれば，$\widehat{\Sigma}$ からさらに k 個の特異値のみをとり出すことで，階数は r から k に下がるものの，A の効率のよい近似を得ることができる．

例 8.3

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 10 & 0 & 10 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

の近似を考えよう．この特異値分解は

$$U = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \qquad \Sigma = \begin{pmatrix} 10\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$V = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

を用いて，$A = U\Sigma V^\dagger$ と表される．A の特異値 $10\sqrt{2}$ はもう一つの特異値 $\sqrt{2}$ に比べて大きいので，$\sqrt{2}$ を無視して階数 1 の行列で A を近似しよう．このとき，その簡約化された特異値分解は

$$\widehat{U} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{\Sigma} = \begin{pmatrix} 10\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad \widehat{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を用いて，$\widehat{U}\widehat{\Sigma}\widehat{V}^\dagger$ となる．したがって，A の近似

$$A \simeq \widehat{U}\widehat{\Sigma}\widehat{V}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

が得られる．A の大きな行列要素のみが，その近似に残っている．

8-2-4　正方行列の極分解

複素数 $z = x + iy$ はその絶対値 $|z| \geq 0$ と偏角 $\theta = \arg z$ を用いて，

$$z = e^{i\theta}|z|$$

という極表示をもつ．ここで，$e^{i\theta} \in \mathrm{U}(1)$ であることに注目して，正方行列に対してこの類似を構成しよう．

$A \in M(n;\mathbb{C})$ の特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ とする．このとき，

$$A = U\Sigma V^\dagger = (UV^\dagger)(V\Sigma V^\dagger)$$

と変形し，

$$W := UV^\dagger, \quad R := V\Sigma V^\dagger$$

とおくと，W はユニタリー行列であり，R はエルミート行列である．さらに，$\mathrm{Spec}(R) = \mathrm{Spec}(\Sigma)$ なので，R の固有値は非負であり，(8.2) より

$$R^2 = V\Sigma V^\dagger V\Sigma V^\dagger = V\Sigma^2 V^\dagger = A^\dagger A$$

となる．すなわち，$R = \sqrt{A^\dagger A}$ である．よって，次の定理が得られた．

定理 8.2　任意の正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，固有値が非負であるエルミート行列 R とユニタリー行列 W が存在して，

$$A = WR \tag{8.8}$$

と分解することができる．

(8.8) を A の極分解という．A が正則であれば，分解は一意的である．A が正則でなければ，その固有値 0 に対応する固有空間に作用する W の部分は一意的には決まらない．

例 8.4 例 8.3 の行列 A の極分解を考えよう．A の特異値分解を

$$A = U\Sigma V^\dagger = (UV^\dagger)(V\Sigma V^\dagger)$$

と変形することにより，

$$A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5\sqrt{2} & 0 & 5\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 5\sqrt{2} & 0 & 5\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

と，ユニタリー行列とエルミート行列の積に分解できる．

8-2-5 正方行列のユニタリー分解

特異値分解を用いると，正方行列をユニタリー行列の和で表すことができる．

定理 8.3 任意の正方行列 $A \in M(n;\mathbb{C})$ に対して，実数 $a \in \mathbb{R}$ とユニタリー行列 $U_1, U_2 \in \mathrm{U}(n)$ が存在して，

$$A = a(U_1 + U_2)$$

と表すことができる．

証明: A の特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ とし，特異値行列を $\Sigma = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_r}) \oplus O_{n-r}$ とする．そこで，$a \in \mathbb{R}$ を

$$-1 \leq \frac{\sqrt{\lambda_j}}{2a} \leq 1 \quad (j = 1, 2, \ldots, r)$$

を満たすようにとり，$\theta_j \in \mathbb{R}$ $(j = 1, 2, \ldots, n)$ を

$$\cos\theta_j = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{\lambda_j}}{2a} & (j = 1, 2, \ldots, r), \\ 0 & (j = r+1, \ldots, n) \end{cases}$$

を満たすようにとる．このとき，

$$\begin{aligned} \Sigma &= a \cdot \mathrm{diag}(2\cos\theta_1, \ldots, 2\cos\theta_n) \\ &= a \cdot \mathrm{diag}\left(e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1}, \ldots, e^{i\theta_n} + e^{-i\theta_n}\right) \\ &= a\left\{\mathrm{diag}\left(e^{i\theta_1}, \ldots, e^{i\theta_n}\right) + \mathrm{diag}\left(e^{-i\theta_1}, \ldots, e^{-i\theta_n}\right)\right\} \end{aligned}$$

と分解できる．ここで，

$$\Sigma_1 := \mathrm{diag}\left(e^{i\theta_1},\ \ldots,\ e^{i\theta_n}\right), \qquad U_1 := U\Sigma_1 V^\dagger,$$

$$\Sigma_2 := \mathrm{diag}\left(e^{-i\theta_1},\ \ldots,\ e^{-i\theta_n}\right), \qquad U_2 := U\Sigma_2 V^\dagger$$

とおくと，$\Sigma_1,\ \Sigma_2 \in \mathrm{U}(n)$ なので，$U_1,\ U_2 \in \mathrm{U}(n)$ であり，

$$A = U\{a(\Sigma_1 + \Sigma_2)\}V^\dagger = a(U\Sigma_1 V^\dagger + U\Sigma_2 V^\dagger) = a(U_1 + U_2)$$

が得られる. ∎

a や $\theta_1, \ldots, \theta_n$ のとり方は一意的ではないので，この分解は一意的ではない.

例 8.5 例題 8.1 の正方行列 $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ のユニタリー分解を構成しよう. A の特異値分解は

$$U = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad V = I_2$$

を用いて，$A = U\Sigma V^\dagger$ と表される. 特異値行列を

$$\Sigma = \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix} e^{i0} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e^{-i0} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/2} \end{pmatrix}\right\}$$

と分解すると，A は

$$A = \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix} 0 & i \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right\}$$

とユニタリー行列の線形結合に分解できる. また，特異値行列を

$$\Sigma = \begin{pmatrix} e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e^{-i\pi/3} & 0 \\ 0 & e^{-i\pi/2} \end{pmatrix}$$

と分解すると，A は

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i \\ e^{i\pi/3} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ e^{-i\pi/3} & 0 \end{pmatrix}$$

とユニタリー行列の和に分解することもできる.

問 8.5 行列 $A = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ の SVD を求め，ユニタリー分解を 1 つ与えよ．

第 II 部

量子力学・量子情報への応用

9. 線形代数と量子力学

本章では，量子力学を線形代数の視点から解説する．量子力学の知識が既知なくても読み進められるように書いているが，前もって基礎を学びたい読者は，例えば古典といわれる [1, 2, 3, 4] を参照されたい．また，[5, 6] はこの章で紹介する量子力学よりさらに進んだ話題を扱っている．

量子力学はいくつかの公理に基づいている．量子力学の公理に何をとるかは，著者の好みによるところが多い．ここでは，量子情報などへの応用を考え以下の公理を採用する．

9-1 量子力学の公理

A1 量子力学における純粋状態は[1]，その物理系に付随する複素ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ のベクトルで表される．ただし，このヒルベルト空間 (内積が付与されたベクトル空間) のベクトル $|\psi\rangle$ と $c|\psi\rangle$ $(c \in \mathbb{C}, c \neq 0)$ は同じ状態を表すものとする[2]．状態をこのようなベクトルで表すことを**射影表現**という．以下では $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ を満たす規格化されたベクトル (単位ベクトル) を扱うが，それでもなお位相の自由度 $(c = e^{i\alpha})$ は残る．

もし $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ が物理系のとりうる状態とすると，それらの線形結合 $c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$ $(c_k \in \mathbb{C})$ も，系がとりうる状態である．これを**重ね合わせの原理**という．

A2 エネルギーや運動量のような物理量 a (これを**観測可能量**，またはオブ

1) 初等量子力学で現れる波動関数で記述される状態である．後で混合状態を導入する．

2) すなわち $|\psi\rangle$ と $c|\psi\rangle$ を同一視する．

ザーバブルという) に対して，ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ に作用するエルミート演算子 (行列) A が存在する．a の測定を行ったとき，得られる値は A の固有値のひとつ λ_j である．

λ_j と λ_k を A の 2 つの固有値，$|\lambda_j\rangle$ と $|\lambda_k\rangle$ をそれぞれの規格化された固有ベクトルとする：

$$A|\lambda_j\rangle = \lambda_j|\lambda_j\rangle, \quad A|\lambda_k\rangle = \lambda_k|\lambda_k\rangle, \quad \langle\lambda_j|\lambda_k\rangle = \delta_{jk}.$$

物理系が $|\psi\rangle = c_j|\lambda_j\rangle + c_k|\lambda_k\rangle$ という重ね合わせ状態にあるとする．同じ状態にある同じ物理系をたくさん用意して各系で物理量 a を測定すると，得られる観測値は λ_j か λ_k の 2 通りしかなく，それが測定ごとにランダムに現れる．$|\psi\rangle$ が規格化されていると (すなわち $|c_j|^2 + |c_k|^2 = 1$)，測定で λ_j が得られる確率は $|c_j|^2$，λ_k が得られる確率は $|c_k|^2$ となる[3)]．$|c_j|^2, |c_k|^2$ が確率を与えることから，c_j, c_k 自身を確率振幅という．さらに，λ_j が測定された直後の系は $|\lambda_j\rangle$ になり，λ_k が測定された直後の系は $|\lambda_k\rangle$ になる．これを波束の収縮という．

3 つ以上の固有ベクトルの重ね合わせ状態への一般化は明らかであろう．

A3 古典力学では，物体の運動はニュートンの運動方程式に従うが，量子力学では，物理系の状態の時間発展はシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{9.1}$$

に従う．ここに $\hbar$ は作用や角運動量の次元 [J·s] をもつ自然定数でプランク定数とよばれる[4)]．また，H はエネルギーに対応するエルミート演算子で，ハミルトニアンとよばれる．

これらの公理について，いくつかコメントしよう．

- 公理 A1 では，規格化された状態 $|\psi\rangle$ は位相 $e^{i\alpha}$ ($\alpha \in \mathbb{R}$) だけの不定性をもつことを述べた．この余分な自由度は，波動関数の代わりに 9-4 節で定義

---

3) 同一状態 $|\psi\rangle$ にある N 個の物理系を用意して a を測定すると，λ_j が観測される頻度は $N|c_j|^2$，λ_k が観測される頻度は $N|c_k|^2$ ということである．1 回の測定で得られる値は λ_j か λ_k のどちらで，それらの平均値が得られるわけではない．

4) 本章では $\hbar$ を省略しない．

する密度行列 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ を用いれば省くことができる．実際，$|\psi\rangle \to e^{i\alpha}|\psi\rangle$ のもとで $\rho \to e^{i\alpha}|\psi\rangle\langle\psi|e^{-i\alpha} = \rho$ となる．

● 公理 A2 は，少し異なる表現に書き直すことができる．$\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$ としよう[5)]．いま，物理量 a を測定する．$A = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ を，対応するエルミート演算子 A のスペクトル分解とする．ただし $A|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$ である．このとき，a の期待値は

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{9.2}$$

で与えられることを量子力学の講義で学んだ読者も多いことだろう[6)]．これは，我々の公理 A2 とどのように関連づけられるのだろうか．まず $|\psi\rangle$ を A の固有ベクトル $|\lambda_i\rangle$ で展開して $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d} c_i|\lambda_i\rangle$ $(\sum_{i=1}^{d} |c_i|^2 = 1)$ と書く．公理 A2 によると，このとき測定値 λ_k を得る確率は $|c_k|^2$ であるので，a の測定値の期待値は $\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i|c_i|^2$ で与えられる．一方，(9.2) は

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{i,j=1}^{d} c_j^* c_i\langle\lambda_j|A|\lambda_i\rangle = \sum_{i,j=1}^{d} c_j^* c_i\lambda_i\delta_{ij} = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i|c_i|^2$$

と変形され，2 つの表現が同等であることが示される．

ここで紹介した測定は射影測定といわれるものである．名前の由来は，特定の測定値 λ_k を得る確率が

$$|c_k|^2 = \langle\psi|P_k|\psi\rangle \tag{9.3}$$

のように射影演算子 $P_k = |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k|$ で与えられ，測定直後の状態が $|\lambda_k\rangle$ に射影されるから，すなわち

$$|\psi\rangle \to \frac{P_k|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_k|\psi\rangle}} = |\lambda_k\rangle \tag{9.4}$$

となるからである．ただし全体の位相は無視した．

---

5)　第 II 部では n を部分系の成分の数など別の意味で使うので，ベクトル空間の次元には d などを用いる．

6)　じつはこの式で a と A が混同されている．a の測定値は A の固有値の一つなので，$\langle a\rangle$ と書くか $\langle A\rangle$ と書くか迷うところである．以下，しばしば物理量 a と，対応する演算子 A を区別せずに使う．

● 公理 A3 のシュレーディンガー方程式 (9.1) は，形式的に解くことができる．ハミルトニアン H が時間に依存しなければ，$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$，ただし

$$U(t) := e^{-iHt/\hbar} \tag{9.5}$$

と書くことができる．実際

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)^n|\psi(0)\rangle \\ &= i\hbar\frac{-iH}{\hbar}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)^{n-1}|\psi(0)\rangle \\ &= H|\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

が示される．

一方，ハミルトニアンが時間に依存する場合は，このように簡単ではない．異なる時刻 t, t' におけるハミルトニアンは，一般に交換しないからである：$[H(t), H(t')] \neq 0$．区間 $[0, t]$ を，幅 Δt の $N = t/\Delta t$ 個の微小区間に分けよう．j 番目の区間の中央の時間を t_j で表す．すると，状態を $|\psi(t=0)\rangle$ から $|\psi(t)\rangle$ まで発展させる時間発展の演算子は，最初の Δt 区間 (時刻 t_1) では $e^{-iH(t_1)\Delta t/\hbar}$ で時間発展し，次の Δt 区間 (時刻 t_2) では $e^{-iH(t_2)\Delta t/\hbar}$ で時間発展し，...，最後の N 番目の Δt 区間 (時刻 t_N) では $e^{-iH(t_N)\Delta t/\hbar}$ で時間発展するので

$$\begin{aligned} U(t) &= \lim_{\Delta t\to 0,\, N=t/\Delta t\to\infty} e^{-iH(t_N)\Delta t/\hbar}\cdots e^{-iH(t_2)\Delta t/\hbar}e^{-iH(t_1)\Delta t/\hbar} \\ &= \lim_{\Delta t\to 0,\, N=t/\Delta t\to\infty} \mathcal{T}\prod_{k=1}^{N} e^{-iH(t_k)\Delta t/\hbar} \\ &= \mathcal{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t)\,dt\right] \end{aligned} \tag{9.6}$$

で表される．ここに $\mathcal{T}$ は，時間の早い行列を右へ，遅い行列を左に並べる「時間順序積」の演算子である．例えば，2 つの行列 $A(t), A(s)$ の積では

$$\mathcal{T}A(t)A(s) := \begin{cases} A(t)A(s) & (t \geq s), \\ A(s)A(t) & (s > t) \end{cases} \tag{9.7}$$

と定義される．$t = s$ のときは $A(t)^2$ となるので，曖昧さはない．より多くの行列の時間順序積の定義は明らかであろう．(9.6) の最後の行は $U(t)$ を象

徴的に表したもので，実際は 2 行目の式を意味する．したがって，この場合の時刻 $t>0$ における波動関数は

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t)\,dt\right]|\psi(0)\rangle \tag{9.8}$$

で与えられる．

(9.5) や (9.6) の演算子 $U(t)$ を時間発展演算子という．これらはユニタリー演算子である．(9.5) がユニタリーであることは簡単なので各自確かめよ．一方，(9.6) に対しても

$$\begin{aligned}
U(t)^\dagger U(t) &= \lim_{\Delta t\to 0,\,N=t/\Delta t\to\infty}\left[e^{iH(t_1)\Delta t/\hbar}e^{iH(t_2)\Delta t/\hbar}\cdots e^{iH(t_N)\Delta t/\hbar}\right]\\
&\qquad\times\left[e^{-iH(t_N)\Delta t/\hbar}\cdots e^{-iH(t_2)\Delta t/\hbar}e^{-iH(t_1)\Delta t/\hbar}\right]\\
&= \lim_{\Delta t\to 0,\,N=t/\Delta t\to\infty}\left[e^{iH(t_1)\Delta t/\hbar}e^{iH(t_2)\Delta t/\hbar}\cdots e^{iH(t_{N-1})\Delta t/\hbar}\right]\\
&\qquad\times\left[e^{-iH(t_{N-1})\Delta t/\hbar}\cdots e^{-iH(t_2)\Delta t/\hbar}e^{-iH(t_1)\Delta t/\hbar}\right]\\
&= \cdots\\
&= I
\end{aligned}$$

が成り立つ．

時間発展演算子がユニタリーであることの重要な帰結として，状態ベクトルの絶対値が時間的に保存することが示される：

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1.$$

問 9.1 (1) A と B をエルミート演算子とし，$|\psi\rangle$ を A, B が作用する任意の状態とする．このとき

$$|\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle|^2 + |\langle\psi|\{A,B\}|\psi\rangle|^2 = 4|\langle\psi|AB|\psi\rangle|^2$$

を示せ．(ヒント: $\langle\psi|AB|\psi\rangle = z\in\mathbb{C}$ とおくこと．)

(2) コーシー–シュワルツの不等式より

$$|\langle\psi|AB|\psi\rangle|^2 \le \langle\psi|A^2|\psi\rangle\langle\psi|B^2|\psi\rangle$$

を証明せよ．

(3) $$|\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle|^2 \le 4\langle\psi|A^2|\psi\rangle\langle\psi|B^2|\psi\rangle$$

を示せ．

(4) 物理量 A の測定値の標準偏差を $\Delta(A) := \sqrt{\langle\psi|A^2|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle^2}$ で定義す

るとき，不確定性関係

$$\Delta(A)\Delta(B) \geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle| \tag{9.9}$$

を示せ [7, 8].

(5) 特に $A := Q$, $B = P := \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{d}{dQ}$ を位置座標，および運動量演算子とする．このとき

$$\Delta(Q)\Delta(P) \geq \frac{\hbar}{2}$$

を示せ.

9-2 簡単な例

量子力学の公理を理解するために，簡単な例をいくつか紹介する.

例 9.1 時間に依存しないハミルトニアンの例として

$$H = -\frac{\hbar}{2}\omega\sigma_z \tag{9.10}$$

をとる.

最初, 系の状態が σ_z の固有値 $+1$ の固有状態 $|\uparrow\rangle$ であったとする: $|\psi(0)\rangle = (1,0)^t$．このとき，任意の時刻 $t > 0$ における状態は

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)(1,0)^t$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{-i\omega t/2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

したがって，$|\psi(t)\rangle$ は $|\psi(0)\rangle$ と位相だけが異なる同じ状態，すなわち $|\uparrow\rangle$ にとどまる．これは，古典物理学とも整合している．古典的な磁気双極子に対し，磁気モーメントに平行に磁束密度を加えても，磁気双極子は影響を受けない．この状態に対して，各スピン行列の期待値をとると

$$\langle\sigma_x\rangle = \langle\psi(t)|\sigma_x|\psi(t)\rangle = (1,0)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle\sigma_y\rangle = \langle\psi(t)|\sigma_y|\psi(t)\rangle = (1,0)\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\langle\sigma_z\rangle = \langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = (1,0)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix} = 1$$

となる．これは，系がスピンの z 成分の固有状態であることから明らかであろう．最初の 2 つの結果は，スピンが x, y 成分をもたないことを意味しているのではなく，後でみるように，それらの測定値が ± 1 をランダムにとり，平均して 0 となることを主張している．実際，$[\sigma_x, \sigma_y] = i\sigma_z$ から，不確定性関係は

$$\Delta(\sigma_x)\Delta(\sigma_y) \geq \frac{1}{2}|\langle\psi(t)|i\sigma_z|\psi(t)\rangle| = \frac{1}{2}$$

となって，$\Delta(\sigma_x), \Delta(\sigma_y)$ ともに 0 にはならない．具体的には

$$\langle\sigma_x^2\rangle = \langle\psi(t)|\sigma_x^2|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|I_2|\psi(t)\rangle = 1, \quad \langle\sigma_y^2\rangle = 1$$

から $\Delta(\sigma_x)\Delta(\sigma_y) = 1$ となって不等式が満たされる．

σ_z を観測したときは，測定値が確率 1 で $+1$ となるが，他のスピン行列はどうだろうか．例として σ_x をとる．σ_x の固有値 1 の固有ベクトルを $|+\rangle = (1,1)^t/\sqrt{2}$, 固有値 -1 の固有ベクトルを $|-\rangle = (1,-1)^t/\sqrt{2}$ とおく．すると，σ_x を観測したとき $+1$ を観測する確率は，量子力学の要請から $|\langle+|\psi(t)\rangle|^2 = 1/2$ となる．同様に，-1 を観測する確率も $|\langle-|\psi(t)\rangle|^2 = 1/2$ となる．したがって，

$$\langle\sigma_x\rangle = (+1)\times\frac{1}{2} + (-1)\times\frac{1}{2} = 0$$

となるのである．上記で「測定値がランダムで」平均が 0 となると述べたのは，観測値が 1 と -1 を同じ確率でランダムにとり，平均して 0 になるという意味である．

次に，同じハミルトニアン H で，初期状態が σ_x の固有値 1 の固有状態 $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^t$ である場合を考えよう．時刻 $t > 0$ における波動関数は

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}e^{-i\omega t/2} & 0\\ 0 & e^{i\omega t/2}\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t/2}\\ e^{i\omega t/2}\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\cos\frac{\omega t}{2}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} + i\sin\frac{\omega t}{2}\begin{pmatrix}-1\\ 1\end{pmatrix}\right].$$

1 段目の右辺は，$|\psi(t)\rangle$ がやはり σ_z の固有値 $+1$ と固有値 -1 の固有ベクト

ルの均一な重ね合わせであることを示している．したがって，σ_z を観測すると，いつ観測しても，$+1$ が得られる確率と -1 が得られる確率はともに $1/2$ で，平均して 0 となる．一方，2 段目は $|\psi(t)\rangle$ が σ_x の固有値 $+1$ と固有値 -1 の固有ベクトルの重ね合わせで，その確率振幅がそれぞれ $\cos\frac{\omega t}{2}$，$i\sin\frac{\omega t}{2}$ と変化することを表している．したがって，σ_x を観測すると，$+1$ が得られる確率は $|\langle +|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$ となり，-1 が得られる確率は $|\langle -|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$ となる．この 2 つの確率を足すと 1 となる．

例 9.2 次に，同様の例として，ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar\omega}{2}\sigma_x \tag{9.11}$$

を考える．時間発展演算子は命題 7.3 から

$$\begin{aligned} U(t) &:= \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i\omega\sigma_x t}{2}\right) \\ &= \cos\frac{\omega t}{2}I_2 + i\sin\frac{\omega t}{2}\sigma_x = \begin{pmatrix} \cos\frac{\omega t}{2} & i\sin\frac{\omega t}{2} \\ i\sin\frac{\omega t}{2} & \cos\frac{\omega t}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

と求められる．

初期状態として $|\psi(0)\rangle = (1,0)^t$ をとる．時刻 $t > 0$ における状態は

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\omega t}{2} \\ i\sin\frac{\omega t}{2} \end{pmatrix} = \cos\frac{\omega t}{2}|\uparrow\rangle + i\sin\frac{\omega t}{2}|\downarrow\rangle.$$

したがって，時刻 t において σ_z を観測したとき，$+1$ を得る確率と -1 を得る確率は，それぞれ

$$P_\uparrow(t) := |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right),$$

$$P_\downarrow(t) := |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

で与えられる．図 9.1 は，$P_\uparrow(t), P_\downarrow(t)$ を図示したものである． 2 つの確率の和が 1 となることはいうまでもない．この状態における σ_z の期待値は

$$\langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \cos\omega t$$

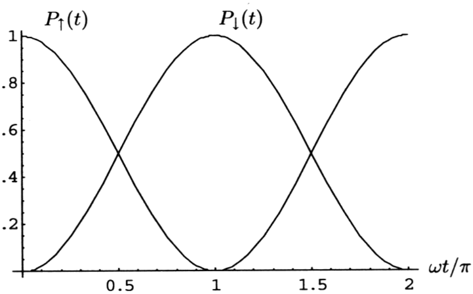


図 9.1 時刻 t で σ_z を観測したとき，観測値 $+1$ を得る確率 $P_\uparrow(t)$ と，観測値 -1 を得る確率 $P_\downarrow(t)$.

となる.

ここで得られた結果は，古典的なスピンの力学と整合している．ハミルトニアン (9.11) は x 軸方向の磁場中のスピンのエネルギーを表す．一方，我々の初期条件は，$t=0$ でスピンが z 軸を向いている場合に対応している．すると，スピンは x 軸まわりに回転し，その z 成分は $\cos\omega t$ のように振動する.

問 9.2 (1) ハミルトニアン

$$H = -\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}\omega(\sigma_x + \sigma_y)$$

を考える．初期条件が $|\psi(0)\rangle = (1,0)^t$ のとき，時刻 $t>0$ における波動関数を求めよ.

(2) 時刻 $t>0$ において，σ_z を測定したとき $+1$ を得る確率を求めよ．また σ_z の期待値を求めよ.

(3) 時刻 $t>0$ において，σ_x を測定したとき $+1$ を得る確率を求めよ．また σ_x の期待値を求めよ.

次に，例 9.1，例 9.2，および問 9.2 の一般化を考えよう．ハミルトニアンとして

$$H = -\frac{\hbar}{2}\omega\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{9.12}$$

とする．ただし $\hat{\boldsymbol{n}}$ は $\mathbb{R}^3$ における単位ベクトル．このとき，時間発展演算子は命題 7.3 から直ちに求められ

$$U(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = \cos\frac{\omega t}{2}\ I_2 + i(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sin\frac{\omega t}{2} \tag{9.13}$$

となる．例として，初期状態 $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)^t$ をとる．このとき，

$$
\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= U(t)|\psi(0)\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\omega t}{2} + i(n_x - in_y + n_z)\sin\dfrac{\omega t}{2} \\ \cos\dfrac{\omega t}{2} + i(n_x + in_y - n_z)\sin\dfrac{\omega t}{2} \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{9.14}
$$

となる．

問 **9.3** (9.14) の波動関数について

(1) 規格化されていることを具体的に示せ．

(2) 時刻 $t > 0$ における $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の期待値を求めよ．

例 9.3 (ラビ振動) ラビ振動は，量子系の制御を行ううえで，大変重要な現象である．z 方向の磁場の中のスピン 1/2 の粒子を考える．この粒子のハミルトニアンは

$$
H_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z \tag{9.15}
$$

で与えられる．このハミルトニアンの固有状態は σ_z の固有ベクトル，すなわち $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ で，固有値はそれぞれ $-\hbar\omega_0/2$ と $\hbar\omega_0/2$ である．

この粒子に角振動数 ω の振動磁場が加えられたとしよう．この磁場は H_0 の 2 つの固有状態の間の遷移をもたらす．この摂動をうけたハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar\omega_0}{2}\sigma_z + \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\omega_0 & \omega_1 e^{i\omega t} \\ \omega_1 e^{-i\omega t} & \omega_0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{9.16}
$$

で与えられる．非対角要素は，2 つの固有状態の間の遷移をもたらす成分 $\langle\uparrow|H|\downarrow\rangle, \langle\downarrow|H|\uparrow\rangle$ で，H のエルミート性から 2 つの非対角要素は互いの複素共役になっている．パラメータ $\omega_1 > 0$ は振動磁場の振幅に比例する実数である．

初期状態が H_0 の基底状態 $|\psi(0)\rangle = (1,0)^t$ であったときの，後の時刻 $t > 0$ における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を求めよう．ハミルトニアンが時間に依存するので，$U(t) = \exp(-iHt)$ とは書けないことに注意しよう．したがって，まと

もに時間発展演算子を求めようとすると，時間順序積を実行しなければならない．ところが，適当なユニタリー行列で時間に依存する座標変換を行えば，ハミルトニアンを時間に依存しないようにできる．$|\psi(t)\rangle$ に対して，$|\phi(t)\rangle$ を

$$|\phi(t)\rangle := e^{-i\omega\sigma_z t/2}|\psi(t)\rangle \tag{9.17}$$

で定義すれば，これらは同じ初期条件 $|\phi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$ を満たす．さらに，簡単な計算により，$|\psi(t)\rangle$ がシュレーディンガー方程式を満たすとき，$|\phi(t)\rangle$ は

$$i\frac{d}{dt}|\phi(t)\rangle = \widetilde{H}|\phi(t)\rangle \tag{9.18}$$

を満たすことが導かれる．ただし

$$\begin{aligned}\widetilde{H} &:= e^{-i\omega\sigma_z t/2}He^{i\omega\sigma_z t/2} - ie^{-i\omega\sigma_z t/2}\frac{d}{dt}e^{i\omega\sigma_z t/2}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\omega_0+\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega_0-\omega \end{pmatrix} = -\frac{\delta}{2}\sigma_z + \frac{\omega_1}{2}\sigma_x \end{aligned} \tag{9.19}$$

である．ここに $\delta = \omega_0 - \omega$ である．$\widetilde{H}$ は時間によらないことに注意されたい．$\widetilde{H}$ を変形すると，(9.12) の形に書くことができる．実際，

$$\widetilde{H} = \frac{\Delta}{2}\left(\frac{\omega_1}{\Delta}\sigma_x - \frac{\delta}{\Delta}\sigma_z\right), \quad \Delta := \sqrt{\delta^2+\omega_1^2} \tag{9.20}$$

が求められる．すると，(9.18) は形式的に積分できて

$$\widetilde{U}(t) := e^{-i\widetilde{H}t} \tag{9.21}$$

$$\begin{aligned} &= \cos\frac{\Delta t}{2}I_2 - i\left(\frac{\omega_1}{\Delta}\sigma_x - \frac{\delta}{\Delta}\sigma_z\right)\sin\frac{\Delta t}{2}\\ &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{2} + i\frac{\delta}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} & -i\frac{\omega_1}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} \\ -i\frac{\omega_1}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} & \cos\frac{\Delta t}{2} - i\frac{\delta}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9.22}$$

が得られる．これから，$t=0$ における波動関数が $|\phi(0)\rangle = (1,0)^t$ のとき，後の時刻 t における波動関数は

$$|\phi(t)\rangle = \widetilde{U}(t)|\phi(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\Delta t}{2} + i\frac{\delta}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} \\ -i\frac{\omega_1}{\Delta}\sin\frac{\Delta t}{2} \end{pmatrix} \tag{9.23}$$

と求められる．

さて，我々が求める波動関数は $|\phi(t)\rangle$ ではなく $|\psi(t)\rangle$ である．(9.17) から，これは

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\omega\sigma_z t/2}|\phi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2}\left(\cos\dfrac{\Delta t}{2} + i\dfrac{\delta}{\Delta}\sin\dfrac{\Delta t}{2}\right) \\ -ie^{-i\omega t/2}\dfrac{\omega_1}{\Delta}\sin\dfrac{\Delta t}{2} \end{pmatrix} \tag{9.24}$$

となる．このように，波動関数に適当なユニタリー変換を施すことにより，時間に依存するハミルトニアンの時間依存性を打ち消すことができる．[7)]

$\omega = \omega_0$ の場合，式は特に簡単になる．この条件を「共鳴条件」とよぼう．このときは $\delta = 0$, $\Delta = \omega_1$ となる．すると，後の時刻 t における波動関数 $|\psi(t)\rangle$ は

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\omega\sigma_z t/2}|\phi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\omega_0 t/2}\cos\dfrac{\omega_1 t}{2} \\ -ie^{-i\omega_0 t/2}\sin\dfrac{\omega_1 t}{2} \end{pmatrix} \tag{9.25}$$

となる．時刻 t において系を観測したとき，系が H_0 の基底状態 (励起状態) にある確率は

$$P_\uparrow = |\langle\uparrow|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{\omega_1 t}{2} \quad \left(P_\downarrow = |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \sin^2\frac{\omega_1 t}{2}\right) \tag{9.26}$$

となる．振動の周波数が ω_0 や ω ではなく，摂動の振幅 ω_1 で決まることに注意されたい．この振動をラビ振動という．周波数 $\omega_1/2$ をラビ周波数という．一方，(9.20) の Δ を一般化されたラビ振動数という．

例 9.4 (ニュートリノ振動)　現在，電子ニュートリノ ν_e，ミュー・ニュートリノ ν_μ，タウ・ニュートリノ ν_τ の 3 種のニュートリノがあることが実験的にわかっている．ここでは，話を簡単にするために ν_e, ν_μ の 2 種類のみを考える．ニュートリノ振動の本質を理解するにはこの 2 種類で十分である．

ニュートリノを測定したときに，観測にかかるのは ν_e と ν_μ のどちらかであるが，これらは質量の固有状態ではない[8)]．質量，すなわちエネルギーの固有状態を $|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle$ とおくと

---

7)　量子力学に詳しい読者は，この変換がシュレーディンガー描像から H_0 を非摂動ハミルトニアンとする相互作用描像への変換であることに気がつくであろう．

8)　観測にかかるニュートリノは「弱い相互作用」の固有状態で，これをフレーバーの固有状態という．

$$H|\nu_k\rangle = E_k|\nu_k\rangle, \quad E_k = \sqrt{p^2c^2 + {m_k}^2c^4} \quad (k=1,2)$$

が成り立つ．ここに m_k は ν_k の質量，p はニュートリノの運動量，c は光速である．$t=0$ で状態が $|\nu_k\rangle$ のとき，後の時刻 t における波動関数は

$$|\nu_k(t)\rangle = e^{-iE_kt/\hbar}|\nu_k\rangle \tag{9.27}$$

で与えられる．

$|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle$ と $|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle$ はユニタリー変換

$$\begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ |\nu_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\nu_e\rangle \\ |\nu_\mu\rangle \end{pmatrix} \tag{9.28}$$

で結ばれている．このユニタリー行列をポンテコルボ–牧–中川–坂田行列とよび [9, 10]，定数 θ を混合角という[9)]．この逆変換は

$$\begin{pmatrix} |\nu_e\rangle \\ |\nu_\mu\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\nu_1\rangle \\ |\nu_2\rangle \end{pmatrix} \tag{9.29}$$

となる．

さて，ある加速器で時刻 $t=0$ に ν_e が生成された．このニュートリノを後の時刻 t で観測したときに，それが ν_μ に振動する確率を求めよう．初期状態は $|\nu_e\rangle = \cos\theta|\nu_1\rangle + \sin\theta|\nu_2\rangle$ である．この初期状態の時刻 t における状態ベクトルは

$$\begin{aligned} |\nu_e(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar}|\nu_e\rangle \\ &= \cos\theta e^{-iE_1t/\hbar}|\nu_1\rangle - \sin\theta e^{-iE_2t/\hbar}|\nu_2\rangle \end{aligned} \tag{9.30}$$

となる．(9.30) は時刻 t における電子ニュートリノの状態ではなく，$t=0$ で $|\nu_e\rangle$ であった状態が，時刻 t まで時間発展した状態であることに注意されたい．したがって，$|\nu_e(t)\rangle$ を観測したとき，それがミュー・ニュートリノである確率は，$|\nu_\mu\rangle = \sin\theta|\nu_1\rangle + \cos\theta|\nu_2\rangle$ を用いて

$$|\langle\nu_\mu|\nu_e(t)\rangle|^2 = \sin^2(2\theta)\sin^2\left[\frac{(E_2-E_1)t}{2\hbar}\right] \tag{9.31}$$

で与えられる．ここでニュートリノの質量は大変小さく，その速さは光速に近いことから $pc \gg m_kc^2$ の近似が正当化されるという事実を用いると，

---

9) ポンテコルボはニュートリノと反ニュートリノの間の振動を提唱し，牧–中川–坂田はここで扱うフレーバー間の振動を提唱した．

$$E_k \simeq pc + \frac{m_k^2 c^3}{2p}$$

が成り立つ．また，加速器と観測点の間の距離を L とすると，観測時刻 t は $t \simeq L/c$ とおいてよい．これらの近似から

$$|\langle \nu_\mu | \nu_e(t) \rangle|^2 \simeq \sin^2(2\theta) \sin^2 \left(\frac{\Delta m^2 c^2 L}{4p\hbar} \right) \tag{9.32}$$

が成り立つ．ここに $\Delta m^2 := |m_2^2 - m_1^2|$ である．この L (すなわち t) の関数としての電子ニュートリノからミュー・ニュートリノへの振動をニュートリノ振動という．したがってニュートリノ振動の波長

$$\lambda = \frac{4\pi p\hbar}{\Delta m^2 c^2} \simeq \frac{4\pi E\hbar}{\Delta m^2 c^3} \simeq \frac{2.5E\,[\mathrm{GeV}]}{\Delta m^2\,[\mathrm{eV}^2]} \tag{9.33}$$

を測ると，ニュートリノの質量差が測定できる．ここで $E \simeq pc$ を用い，最後の近似式では $\hbar$ や c に数値を代入した後，電子ボルトを単位にとった．

ニュートリノ振動が生じるには，有限の混合角 θ と，質量差 Δm^2 が必要である．素粒子の「標準模型」ではニュートリノの質量は 0 であるが，ニュートリノ振動は実験的に観測され，ニュートリノ質量の存在は実証されている．ニュートリノ振動の発見は 2015 年のノーベル物理学賞の対象となっている[10)]．

(9.28) が，一般のユニタリー行列でなく直交行列であることに気づいた読者のために補足をする．(9.28) の代わりに，ユニタリー行列

$$U_1 = \begin{pmatrix} e^{i\alpha}\cos\theta & e^{i\beta}\sin\theta \\ -e^{i\gamma}\sin\theta & e^{i(-\alpha+\beta+\gamma)}\cos\theta \end{pmatrix} \quad (\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R})$$

を考える．右下の行列要素の位相は U_1 がユニタリー行列となるように決めた．U_1 を用いると

$$|\nu_1\rangle = e^{i\alpha}\cos\theta|\nu_e\rangle + e^{i\beta}\sin\theta|\nu_\mu\rangle,$$
$$|\nu_2\rangle = -e^{i\gamma}\sin\theta|\nu_e\rangle + e^{i(-\alpha+\beta+\gamma)}|\nu_\mu\rangle$$

となる．ここで，各ニュートリノの波動関数を

---

10) `https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2015/press.html` をみよ．

$$|\nu_1'\rangle := e^{-i\alpha}|\nu_1\rangle, \quad |\nu_2'\rangle := e^{-i\gamma}|\nu_2\rangle, \quad |\nu_e'\rangle := |\nu_e\rangle, \quad |\nu_\mu'\rangle := e^{i(\beta-\alpha)}|\nu_\mu\rangle$$

と再定義すると，$\{|\nu_1'\rangle, |\nu_2'\rangle, |\nu_e'\rangle, |\nu_\mu'\rangle\}$ は (9.28) に従って変換する．

ニュートリノの波動関数の再定義により，位相が波動関数に吸収できるのは 2 つのニュートリノまでで，それ以上ニュートリノが増えると必ず位相は残る．

9-3 多成分系，テンソル積状態，エンタングル状態

いままでは，暗に系は 1 つの物理系であることを前提としてきた．系が複数の部分系から構成されると，そこには古典的には到底イメージできないタイプの状態が出現する．話を具体的にするために，いま系は 2 つの部分系から構成されるとしよう．例えば，1 つの系は原子 1，もう一つの系は別の原子 2 を想像されたい．最初の系にはヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1$ が，2 つ目の系には別のヒルベルト空間 $\mathcal{H}_2$ が付随する．このような系を **2 成分系**という[11]．ここで $d_1 := \dim \mathcal{H}_1, d_2 := \dim \mathcal{H}_2$ とおこう．すると両成分をあわせた全体の系のヒルベルト空間は $\mathcal{H} := \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ で与えられる．以前みたように，このヒルベルト空間のベクトルは

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2} c_{ij}|e_i^{(1)}\rangle \otimes |e_j^{(2)}\rangle \tag{9.34}$$

と表される．ここに $\{|e_j^{(a)}\rangle\}$ $(a = 1, 2)$ はヒルベルト空間 $\mathcal{H}_a$ の正規直交基底で，c_{ij} は $\displaystyle\sum_{i=1}^{d_1}\sum_{j=1}^{d_2} |c_{ij}|^2 = 1$ を満たす．

状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ のなかで，$|\psi\rangle := |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ $(|\psi_a\rangle \in \mathcal{H}_a)$ のように，$\mathcal{H}_a$ $(a = 1, 2)$ の 2 つのベクトルのテンソル積で書かれる状態をテンソル積状態という．テンソル積状態は，「1 番目の系は波動関数 $|\psi_1\rangle$ で表され，2 番目の系は波動関数 $|\psi_2\rangle$ で表される」という記述を許す．それぞれの波動関数 $|\psi_a\rangle$ は重ね合わせ状態かもしれないが，それは問題ではない．日常生活で巨視的な 2 つの物体，例えばリンゴとナシが与えられたとき，それ全体を記述するようにいわれると，リンゴの色や匂い，味，重さなどと，ナシの色や匂い，

11) 2 成分を英語で bipartite，多成分を multipartite という．通常の辞書にはこのような意味では載っていないかもしれない．

味，重さなどを独立に与えて全体の系を記述する．テンソル積状態も，このように各成分の状態が独立に指定される状態である．それぞれの波動関数を指定するのに $\dim \mathcal{H}_a$ だけの係数が必要なので，テンソル積状態の独立な係数の数 (次元) は $\dim \mathcal{H}_1 + \dim \mathcal{H}_2$ となる[12)]．テンソル積で表されるベクトルの和はテンソル積で表されるベクトルとは限らないので，テンソル積のベクトルの集合は全ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の部分ベクトル空間ではない．全系が，さらに多くの p 個の成分から構成されると，テンソル積状態の独立な係数の個数は $\sum_{a=1}^{p} \dim \mathcal{H}_a$ となる．

2 成分系に話をもどそう．全ヒルベルト空間の次元は，(9.34) からわかるように c_{ij} の個数，すなわち $\dim \mathcal{H} = d_1 d_2$ である．この次元は，d_a $(a = 1, 2)$ が大きいとき，または成分の個数が大きいとき $(p \gg 1)$ は，テンソル積状態の次元に比べると，とても大きくなる．これは，テンソル積状態は全ヒルベルト空間のごく一部しか占めないことを意味する．では，何が抜けているのだろうか？　ここで，2 つのスピンからなる状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \right) \tag{9.35}$$

を考えよう．もし $|\psi\rangle$ が

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (a_1|\uparrow\rangle + a_2|\downarrow\rangle) \otimes (b_1|\uparrow\rangle + b_2|\downarrow\rangle) \\ &= a_1 b_1 |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + a_1 b_2 |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + a_2 b_1 |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle + a_2 b_2 |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

のようにテンソル積に分解されるとすると，係数は $a_1 b_2 = a_2 b_1 = 0$, $a_1 b_1 = a_2 b_2 = 1/\sqrt{2}$ を同時に満たさなければならないが，それはありえない．実際，最初の条件は $a_1 = 0$ または $b_2 = 0$ を意味するが，$a_1 = 0$ は $a_1 b_1 = 1/\sqrt{2}$ と矛盾し，$b_2 = 0$ は $a_2 b_2 = 1/\sqrt{2}$ と矛盾する．したがって，状態 $|\psi\rangle$ はテンソル積には書けない．つまり $|\psi\rangle$ に対しては，「1 番目のスピンが $|\psi_1\rangle$ で，2 番目のスピンが $|\psi_2\rangle$ である」という記述ができないのである．日常生活ではこのような事態には遭遇しないので不思議に思われるが，量子の世界ではこのような状態はいたるところに現れる．

---

12) 規格化条件や波動関数全体にかかる位相は無視する．

このように，テンソル積で表せない状態をエンタングル状態とかもつれた状態という．上記に述べたように，各成分の次元が大きくなるほど，また成分の数が増えるほど，ほとんどの状態はエンタングル状態となる．これらの状態を用いると，古典情報処理をはるかに超える情報処理が可能となる．そのいくつかは，この後の章で解説を行う．

2 成分系の状態 (9.34) が与えられたとしよう．この状態がテンソル積状態かエンタングル状態であるか判定する条件を求めよう．そのために，状態 $|\psi\rangle$ のシュミット分解を用いる．

命題 9.1 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ を 2 成分系のヒルベルト空間とする．$d_a := \dim \mathcal{H}_a$ $(a = 1, 2)$ とおくと，一般に $d_1 \neq d_2$ である．このとき $\mathcal{H}$ の任意のベクトル $|\psi\rangle$ に対し，次のシュミット分解ができる：

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{r} \sqrt{s_j}\, |f_j^{(1)}\rangle \otimes |f_j^{(2)}\rangle. \tag{9.36}$$

ただし，$r \leq m, n$ で $s_j > 0$, $\sum_j s_j = 1$，また，$\{|f_j^{(a)}\rangle\}$ は $\mathcal{H}_a$ の正規直交ベクトルである．s_j を $|\psi\rangle$ のシュミット係数という．

証明： この命題は特異値分解の直接の帰結である．$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ を $|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |e_i^{(1)}\rangle \otimes |e_j^{(2)}\rangle$ と展開しよう．ただし $\{|e_i^{(a)}\rangle\}$ は $\mathcal{H}_a$ の基底とする．その c_{ij} は行列 $C := (c_{ij}) \in M(d_1, d_2; \mathbb{C})$ を定義する．この C を特異値分解すると $C = U\Sigma V^\dagger$ が得られる．ここに $U \in \mathrm{U}(d_1)$, $V \in \mathrm{U}(d_2)$，Σ は特異値行列で，その r 個の特異値は正の実数である．$c_{ij} = \sum_{k,\ell} U_{ik} \Sigma_{k\ell} V_{j\ell}^*$ を用いると，$|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j,k,\ell} U_{ik} \Sigma_{k\ell} V_{j\ell}^* |e_i^{(1)}\rangle \otimes |e_j^{(2)}\rangle$$

と書くことができる．そこで，$1 \leq k \leq r$ に対し $|f_k^{(1)}\rangle := \sum_i U_{ik} |e_i^{(1)}\rangle$ と $|f_k^{(2)}\rangle := \sum_j V_{jk}^* |e_j^{(2)}\rangle$ を定義する．U と V はユニタリーであるから，$\{|f_k^{(a)}\rangle\}$ は $\mathcal{H}_a$ の正規直交ベクトルである．$1 \leq k, \ell \leq r$ のとき $\Sigma_{k\ell} = d_k \delta_{k\ell}$ に注意すると

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{r} d_k |f_k^{(1)}\rangle \otimes |f_k^{(2)}\rangle$$

が得られる．この展開で，特異値の数 r をシュミット・ランクまたはシュミット数とよぶ．そこで，正の実数 d_k を $\sqrt{s_k}$ で置き換えるとベクトル (9.36) が得られる．さらに

規格化条件から $1=\langle\psi|\psi\rangle=\sum_k s_k$ が示される． ∎

したがって，ベクトル $|\psi\rangle\in\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ がテンソル積状態 $|\psi\rangle=|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$ であることと，そのシュミット・ランクが 1 であることとは同値である[13]．

例 9.5 $\mathcal{H}_1=\mathbb{C}^2$，$\mathcal{H}_2=\mathbb{C}^3$ とする．この 2 成分系の波動関数を

$$|\psi\rangle=\frac{1}{2}(i|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle+|e_2^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle+i|e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle+|e_2^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle)$$

とする．この係数がつくる行列は

$$C=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & i\\ i & 0 & 1\end{pmatrix}$$

である．この行列は，以前，特異値分解を学んだときに問 8.2 で扱った行列 A と本質的に同じものである．C の SVD は

$$C=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

となる．したがって $|\psi\rangle$ のシュミット・ランクは 2 であり，この状態はエンタングルしている．

問 9.4 $\mathbb{C}^4\otimes\mathbb{C}^4$ の状態

$$\begin{aligned}|\psi\rangle=\frac{1}{3}\Big(&|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle-\frac{1}{2}|e_1^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle+\frac{1}{2}|e_1^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle+|e_1^{(1)}\rangle|e_4^{(2)}\rangle\\ &+|e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle+\frac{1}{2}|e_2^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle-\frac{1}{2}|e_2^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle+|e_2^{(1)}\rangle|e_4^{(2)}\rangle\\ &+|e_3^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle+|e_3^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle+|e_4^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle+|e_4^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle\Big)\end{aligned}$$

はテンソル積状態かエンタングル状態か判定せよ．テンソル積状態の場合は $|\psi\rangle$ をテンソル積に分解し，エンタングル状態のときにはシュミット・ランクを求めよ．

13）2-1-5 項でも述べたが，ベクトルのテンソル積では $\otimes$ を省略することが多い．

9-4　混合状態と密度行列

9-4-1　混合状態

いままで，物理系がある決まった波動関数で記述される場合を考えてきた．このような状態を純粋状態という．しかし多くの場合に，系の波動関数が確定せず，ある波動関数 $|\psi_k\rangle$ $(1 \le k \le s)$ が確率 p_i で出現するとしか記述できない場合がある．このような状態を，純粋状態に対して混合状態という．規格化されたベクトルの組 $\{|\psi_k\rangle\}$ は必ずしも直交しているとは限らない．

よく知られた例は，統計力学におけるカノニカル・アンサンブルで，ある量子系において，固有値 E のエネルギー固有状態が出現する確率は

$$p(E) := \frac{e^{-E/k_B T}}{Z(T)}, \quad Z(T) := \operatorname{tr} e^{-H/k_B T} = \sum_E e^{-E/k_B T}$$

で与えられる．ここに T は温度，k_B はボルツマン定数，$Z(T)$ は分配関数である．$\sum_E p(E) = 1$ は定義から明らかであろう．

また，自然光などの通常の光源から出る光子はランダムに偏光している．これを縦向きの偏光状態 $|V\rangle$ しか通さない偏光フィルタを通すと，確率 1/2 で透過し，確率 1/2 で吸収される．一般の光はさまざまな方向に偏光している．しかし，いま述べたことから，これを確率 1/2 で水平偏光状態 $|H\rangle = (1,0)^t$ の光子，確率 1/2 で垂直偏光状態 $|V\rangle = (0,1)^t$ の光子の混合状態とみなすことができる．

波動関数が確定せず，確率 p_k で $|\psi_k\rangle$ がランダムに出現することと，純粋状態にも存在する測定結果のランダムさと混同してはならない．ある量子状態 $|\psi_k\rangle$ が実現すると，そこでいままで説明した測定結果のランダムさが現れるが，混合状態ではさらに状態 $|\psi_k\rangle$ の出現自体が確率 p_k でランダムなのである．また，混合状態を重ね合わせ状態と混同してはならない．$|H\rangle$ と $|V\rangle$ の等比率の混合状態と，重ね合わせの純粋状態 $(|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ はまったく異なる状態である．後者はうまく基底ベクトルを選べば，1 つの基底ベクトルで表すことができるが，前者はどのように基底変換しても 1 つの基底ベクトルでは表すことができない．

9-4-2 密度行列

状態とその状態が現れる確率の組 $\{|\psi_k\rangle, p_k\}_{1\le k\le s}$ で表される混合状態を考えよう．ここに s は，混合状態に含まれている純粋状態の数である．規格化された状態 $|\psi_k\rangle$ における物理量 A の期待値は $\langle\psi_k|A|\psi_k\rangle$ で与えられる．したがって，物理量 A の混合状態における期待値は

$$\langle A\rangle = \sum_{k=1}^{s} p_k\langle\psi_k|A|\psi_k\rangle \tag{9.37}$$

で与えられることがわかる．

混合状態を表すには，密度行列を導入するのが便利である．状態とその状態が現れる確率の組 $\{|\psi_k\rangle, p_k\}_{1\le k\le s}$ が与えられたとき，この混合状態を表す密度行列 ρ を

$$\rho := \sum_{k=1}^{s} p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k| \qquad \left(0\le p_k\le 1,\ \sum_{k=1}^{s} p_k = 1\right) \tag{9.38}$$

で定義する．すると，(9.37) は簡潔に

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \sum_{k=1}^{s}\sum_{i=1}^{d} p_k\langle\psi_k|A|e_i\rangle\langle e_i|\psi_k\rangle = \sum_{k=1}^{s}\sum_{i=1}^{d} p_k\langle e_i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|A|e_i\rangle \\ &= \mathrm{tr}\,(\rho A)\end{aligned} \tag{9.39}$$

と表される．ここに d はヒルベルト空間の次元，$\{|e_i\rangle\}_{1\le i\le d}$ はヒルベルト空間の正規直交基底で，完全性関係 $\sum_{k=1}^{d}|e_k\rangle\langle e_k| = I_d$ を用いた．

純粋状態はある k に対し $p_k = 1$ で，それ以外の $p_i = 0\ (i\ne k)$ であるような特別な混合状態とみなすことができる．また $|\psi_k\rangle$ を密度行列 $|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ で表すことにより，$|\psi_k\rangle$ の位相依存性をとり去ることができるので，数学的にもメリットがある．

例 9.6 統計力学のカノニカル・アンサンブルを考えよう．エネルギーが E である状態 $|E\rangle$ が現れる確率は

$$p(E) = e^{-E/k_BT}/Z(T), \quad Z(T) = \mathrm{tr}\, e^{-H/k_BT}$$

であるから，密度行列 ρ は

$$\rho = \sum_E \frac{e^{-E/k_BT}}{Z(T)}|E\rangle\langle E| = \frac{e^{-H/k_BT}}{Z(T)}$$

というよく知られた形になる．ここで $e^{-H/k_BT} = \sum_E e^{-E/k_BT}|E\rangle\langle E|$ を用いた．

問 9.5　$A \in M(d;\mathbb{C})$ をエルミート行列とする．A がヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ の任意のベクトル $|\psi\rangle$ に対し $\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0$ を満たすとき，A を非負行列または半正定値行列という．A が非負行列のとき，A のすべての固有値は非負であることを証明せよ．逆に，エルミート行列 A の固有値がすべて非負のとき，任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対し $\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0$ となることを示せ．行列 A が非負のとき $A \geq 0$ と書く．

密度行列 ρ は線形作用素であることに加えて，満たすべき性質が 3 つある．それは $\mathrm{tr}\,\rho = 1$, $\rho^\dagger = \rho$, $\rho \geq 0$ である．実際，

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,\rho &= \sum_{k=1}^{s}\sum_{i=1}^{d} p_k\langle e_i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|e_i\rangle = \sum_{k=1}^{s}\sum_{i=1}^{d} p_k\langle\psi_k|e_i\rangle\langle e_i|\psi_k\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{s} p_k\langle\psi_k|\psi_k\rangle = \sum_{k=1}^{s} p_k = 1,\end{aligned}$$

$$\rho^\dagger = \sum_{k=1}^{s} p_k^*|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_{k=1}^{s} p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \rho,$$

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_{k=1}^{s} p_k\langle\phi|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\phi\rangle = \sum_{k=1}^{s} p_k|\langle\phi|\psi_k\rangle|^2 \geq 0.$$

ただし $|\phi\rangle$ は任意のベクトルである．

さらに，密度行列 ρ は，純粋状態の公理と似た公理を満たす．

A1′ ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ をもつ量子系の混合状態は，密度行列 $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ によって指定される．密度行列は $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ を満たす非負のエルミート行列である．

A2′ 物理量 a の期待値は

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}\,(\rho A) \tag{9.40}$$

で与えられる．((9.39) 参照．)

A3′ 密度行列の時間発展はリウビル–フォンノイマン方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho = [H, \rho] \tag{9.41}$$

で与えられる．ここに H は，系のハミルトニアンである．

閉じた系において，密度行列 $\rho=\sum_{k=1}^{s}p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ の各 $|\psi_k\rangle$ は，シュレーディンガー方程式 $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_k\rangle=H|\psi_k\rangle$ を満たす．この式のエルミート共役は $-i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi_k|=\langle\psi_k|H$ となる．これらの式を使うと

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{d}{dt}\rho&=i\hbar\frac{d}{dt}\sum_{k=1}^{s}p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\\&=\sum_{k=1}^{s}p_kH|\psi_k\rangle\langle\psi_k|-\sum_{k=1}^{s}p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|H\\&=[H,\rho]\end{aligned}$$

となり，リウビル–フォンノイマン方程式が示される．

ある物理系が与えられたとき，そのすべての可能な状態の集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ で表す．ここに，$\mathcal{H}$ は量子系に付随するヒルベルト空間である．簡単に確認できるように，$\rho_1,\rho_2\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ であれば $t\rho_1+(1-t)\rho_2$ も密度行列である．したがって $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は，図 9.2 で示されるように凸集合である．

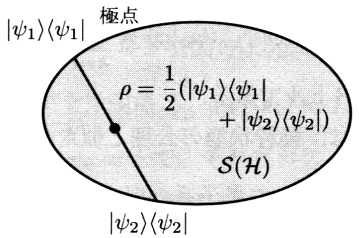


図 9.2 密度行列の集合 $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の概略図．境界の点 (極点) は純粋状態を表し，内部の点は混合状態を表す．

問 9.6 上記の主張「$t\rho_1+(1-t)\rho_2$ は密度行列である」を示せ．ただし，$0\le t\le 1$ である．

例 9.7 すでに述べたように，純粋状態 $|\psi\rangle$ は混合状態の特別な場合である．対応する密度行列は，定義から

$$\rho=|\psi\rangle\langle\psi| \tag{9.42}$$

で与えられる．したがって，純粋状態の密度行列は，その状態への射影演算子にほかならない．純粋状態 $|\psi\rangle$ における物理量 A の期待値を密度行列を使って表すと，$d = \dim \mathcal{H}$ として

$$\langle A\rangle = \mathrm{tr}\,(\rho A) = \sum_{i=1}^{d} \langle e_i|\psi\rangle\langle\psi|A|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{d} \langle\psi|A|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

となり，従来の純粋状態における期待値と一致する．一般の密度行列は，純粋状態の密度行列の凸結合である[14)]．別の見方をすると，純粋状態の密度行列は，状態の集合 $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の境界の点 (極点) に対応する．純粋状態の階数は 1 である．純粋状態で表すことができない混合状態は 2 以上の階数をもつ．

例 9.8　光子のビームを考えよう．横偏光状態 $|H\rangle = (1,0)^t$ と縦偏光状態 $|V\rangle = (0,1)^t$ を正規直交基底にとる．ビームが 2 つの偏光状態の完全に一様な混合状態であれば，その密度行列 ρ は

$$\rho = \frac{1}{2}|H\rangle\langle H| + \frac{1}{2}|V\rangle\langle V| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}I_2$$

で与えられる．この状態を $|H\rangle$ と $|V\rangle$ の一様混合状態という．

ビームの光子が純粋状態 $|\psi\rangle = (|H\rangle + |V\rangle)/\sqrt{2}$ にあるとする．このとき，$\{|H\rangle, |V\rangle\}$ 基底における密度行列 ρ は

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

となる．もし $|\psi\rangle$ 自身が基底ベクトルの一つとすると，他の基底ベクトルは $|\phi\rangle = (|H\rangle - |V\rangle)/\sqrt{2}$ にとることができる．このとき，基底 $\{|\psi\rangle, |\phi\rangle\}$ における密度行列 ρ は

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となる．

$A = \sum_{a=1}^{d} \mu_a|\mu_a\rangle\langle\mu_a|$ を物理量 A のスペクトル分解，$\rho = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ を

14) 集合 S の s 個の点 x_i が与えられたとき，$\sum_{i=1}^{s} t_i x_i$ (ただし $\sum_{i=1}^{s} t_i = 1,\ 0 \le t_i \le 1$) を $\{x_i\}$ の凸結合という．

密度行列 ρ のスペクトル分解とする．ただし，d はヒルベルト空間の次元である．各純粋状態 $|\lambda_i\rangle$ で測定値 μ_a を得る確率は $|\langle\mu_a|\lambda_i\rangle|^2$ であるから，状態 ρ における A の測定で μ_a を得る確率は

$$p(a) := \sum_{i=1}^{d} \lambda_i |\langle\mu_a|\lambda_i\rangle|^2 = \langle\mu_a|\rho|\mu_a\rangle = \mathrm{tr}\,(P_a\rho) \tag{9.43}$$

となる．ここに $P_a = |\mu_a\rangle\langle\mu_a|$ は固有ベクトル $|\mu_a\rangle$ 方向への射影演算子である．測定値 μ_a が得られた直後の状態は純粋状態 $|\mu_a\rangle\langle\mu_a|$ となっている．この変化は

$$\rho \mapsto \frac{P_a\rho P_a}{p(a)} = \frac{\langle\mu_a|\rho|\mu_a\rangle|\mu_a\rangle\langle\mu_a|}{p(a)} = |\mu_a\rangle\langle\mu_a|$$

と表される．

以下の定理は，状態 ρ が純粋状態か混合状態かを判定する．

定理 9.1 密度行列 ρ が純粋状態であるための必要十分条件は，それが $\rho^2 = \rho$ を満たすことである．

証明： $\rho = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ を密度行列 ρ のスペクトル分解とする．$\rho^2 = \rho$ が成り立てば，$\rho^2 = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i^2 |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| = \rho$ より，すべての i に対し，固有値は $\lambda_i^2 = \lambda_i$ を満たす．したがって，このとき λ_i は 0 か 1 しかありえない．$\mathrm{tr}\,\rho = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i = 1$ から，これはある k $(1 \leq k \leq d)$ に対してのみ $\lambda_k = 1$ であり，その他の i $(\neq k)$ に対しては $\lambda_i = 0$ であることを示している．すなわち $\rho = |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k|$ である．

逆は自明である． ∎

問 9.7 状態 ρ が純粋状態であるための必要十分条件は，$\mathrm{tr}\,\rho^2 = 1$ であることを証明せよ．

純粋状態が，テンソル積状態とエンタングル状態に分けられるように，混合状態も 2 つのクラスに分けられる．ここでは記法を簡単にするために 2 成分系を例にとって説明する．

定義 9.1 2 成分系を考えよう．第 1 成分を表すヒルベルト空間を $\mathcal{H}_1$，第 2 成分を表すヒルベルト空間を $\mathcal{H}_2$ とする．$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ を全系を表すヒルベルト空間とする．密度行列 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は，それが

$$\rho = \sum_{k=1}^{s} p_k \rho_{1,k} \otimes \rho_{2,k} \quad (0 \le p_k \le 1,\ \sum_{k=1}^{s} p_k = 1) \tag{9.44}$$

の形に書けるとき，セパラブルという．$\rho_{1,k} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_1)$, $\rho_{2,k} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_2)$ は，それぞれ第 1 成分と第 2 成分の密度行列である．

もし ρ が (9.44) のように分解できないとき，ρ は非セパラブルという．

セパラブルな状態は，テンソル積状態 $\rho_{1,k} \otimes \rho_{2,k}$ を，ウエイト p_k で混合したものであり，純粋状態のテンソル積状態に対応する．一方，非セパラブルな状態は，このような分解ができず，純粋状態におけるエンタングル状態に対応する．しかし，このような分類以外にも量子相関を記述する分類がある．

一般に，与えられた密度行列がセパラブルか非セパラブルか判断することは難しい．しかし，低次元の 2 成分系では以下のようにその判定ができる．

9-4-3　ネガティビティ

2 成分系が与えられ，ρ はその密度行列とする．ρ の部分転置 $\rho^{\rm pt}$ を，2 番目のヒルベルト空間に関する添え字の転置で

$$\rho_{ij,k\ell} \to \rho_{i\ell,kj} \tag{9.45}$$

と定義する．ここで $\{|e_k^{(1)}\rangle\}$ を第 1 成分の基底，$\{|e_k^{(2)}\rangle\}$ を第 2 成分の基底とすると

$$\rho_{ij,k\ell} = (\langle e_i^{(1)}| \otimes \langle e_j^{(2)}|)\ \rho\ (|e_k^{(1)}\rangle \otimes |e_\ell^{(2)}\rangle)$$

である．

さて，ρ が (9.44) で与えられるセパラブルな状態としよう．すると，その部分転置は

$$\rho^{\rm pt} = \sum_{i=1}^{s} p_i \rho_{1,i} \otimes \rho_{2,i}^t \tag{9.46}$$

で与えられる．任意の密度行列 ρ に対し，その転置 ρ^t も別の密度行列であることに注意しよう．実際，転置に対して

(i) 跡は不変 $(\mathrm{tr}\,\rho = \mathrm{tr}\,\rho^t = 1)$,

(ii) エルミート性は変わらない,

(iii) 固有値は不変なので非負性は保存される．

したがって，状態がセパラブルであるとき，その部分転置 (9.46) も，別の密度行列となる．ペレスは，$\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ および $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^3$ をヒルベルト空間とするような 2 体系において，部分転置した状態の非負性は ρ がセパラブルであるための必要十分条件であると予想し [13]，ホロデツキ一家はそれを証明した [14]．逆に，これらの系において ρ の部分転置が密度行列でなければ，ρ は非セパラブルである．証明は本書の範囲を超えるので省略する．興味のある読者は原論文を参照されたい．

いくつかの例を考察しよう．

例 9.9 行列

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-p}{4} & 0 \\ \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix} \qquad (0 \le p \le 1) \tag{9.47}$$

は密度行列であることは各自確かめよ．ここで，基底ベクトルは

$$|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle, \quad |e_1^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle, \quad |e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle, \quad |e_2^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle$$

の順番に並べてある．部分転置のもとで，例えば

$$\begin{aligned} \rho_{11,22} &= (\langle e_1^{(1)}|\langle e_1^{(2)}|)\ \rho\ (|e_2^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle) \\ &\to (\langle e_1^{(1)}|\langle e_2^{(2)}|)\ \rho\ (|e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle) = \rho^{\mathrm{pt}}_{12,21} \end{aligned}$$

などから，

$$\rho^{\mathrm{pt}} = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{4} & \frac{p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p}{2} & \frac{1-p}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}$$

が容易に確かめられる．一般に，ρ^{pt} は物理的に意味のある状態とは限らない．$\mathrm{tr}\,\rho^{\mathrm{pt}} = 1$ とエルミート性は保証されるが，場合によっては ρ^{pt} が負の固有値をもち，そのときは ρ^{pt} は物理的な状態を表さない．上記の ρ^{pt} の特性方程式は

$$D(\lambda) = \det(\rho^{\mathrm{pt}} - \lambda I_4) = \left(\lambda - \frac{1+p}{4}\right)^3 \left(\lambda - \frac{1-3p}{4}\right) = 0$$

となる．固有値は 3 重に縮退した $\lambda = (1+p)/4$ と，縮退していない $\lambda = (1-3p)/4$ である．したがって，$1/3 < p \leq 1$ を満たす p に対し，ρ^{pt} は物理的な状態を表さず，ρ は非セパラブルな状態を表す．

このように，非セパラブルな状態は，その部分転置行列の負の固有値で特徴づけられる．これを定量化したものがネガティビティである．$d = \dim \mathcal{H}$ のとき，ネガティビティは

$$N(\rho) := \left(\sum_{i=1}^{d} |\lambda_i| - 1 \right) \tag{9.48}$$

で定義される．ただし $\{\lambda_i\} = \mathrm{Spec}(\rho)$ である．密度行列は固有値がすべて非負なのでネガティビティは 0，負の固有値をもつ「密度行列もどき」に対しては正の値をとる．

問 9.8　2 成分系 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ のワーナー状態は

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1-p}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+p}{4} & -\frac{p}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{p}{2} & \frac{1+p}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-p}{4} \end{pmatrix} \qquad (0 \leq p \leq 1) \tag{9.49}$$

で与えられる．このとき ρ^{pt} を求め，$1/3 < p \leq 1$ のとき ρ^{pt} は正のネガティビティをもつことを示せ．

問 9.9　2 成分系 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ の密度行列

$$\rho_2 = \begin{pmatrix} \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{2} & \frac{1-p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{2} & \frac{1-p}{2} & 0 \\ \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \end{pmatrix} \qquad (0 \leq p \leq 1) \tag{9.50}$$

のネガティビティは $p = 1/2$ のときのみ 0 となることを示せ．また，$p = 1/2$ のとき

$$\rho_2 = \frac{1}{4} \left(I_2 \otimes I_2 + \sigma_x \otimes \sigma_x \right)$$

と書けることを確かめよ．

9-4-4　部分跡と純粋化

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ を 2 体系のヒルベルト空間とする．A を $\mathcal{H}$ に作用する任意の線形演算子とする．このとき A の $\mathcal{H}_2$ に関する部分跡は，$\mathcal{H}_1$ に作用する

線形演算子で

$$A_1 := \operatorname{tr}_2 A = \sum_{k=1}^{d_2} (I \otimes \langle e_k^{(2)}|) A (I \otimes |e_k^{(2)}\rangle) \in M(d_1; \mathbb{C}) \tag{9.51}$$

と定義される．ここに $d_a := \dim \mathcal{H}_a$ $(a = 1, 2)$ で，$\{|e_k^{(a)}\rangle\}$ は $\mathcal{H}_a$ の正規直交基底である．$A = A^{(1)} \otimes A^{(2)}$ のときは，部分跡は $A_1 = (\operatorname{tr} A^{(2)}) \times A^{(1)}$ となり，定数を除いて本質的に $A^{(1)}$ と同じであるが，テンソル積ではない A に対しては変更を受ける．

ρ を $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の状態を表す密度行列とする．ここで，我々は 1 番目の系に興味があり，2 番目の系には興味がない，または 2 番目の系にはアクセスできないとしよう．このときは 2 番目の系に関して部分跡をとることにより，その存在を一見忘れることができる．しかし，以下にみるように，2 番目の系の存在はさまざまな形で 1 番目の系に顔を出す．

例 9.10 例として，次の 2 体系の純粋状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle + |e_2^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle)$$

を考えよう．ただし $\{|e_i^{(a)}\rangle\}$ は a 番目の系の正規直交基底である．対応する密度行列は

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

ただし基底ベクトルは

$$|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle, \quad |e_1^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle, \quad |e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle, \quad |e_2^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle$$

の順に並べた．2 番目の系に関する ρ の部分跡は

$$\rho_1 := \operatorname{tr}_2 \rho = \sum_{i=1,2} (I \otimes \langle e_i^{(2)}|) \rho (I \otimes |e_i^{(2)}\rangle) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9.52}$$

となる．純粋状態 $|\psi\rangle$ が一様混合状態 ρ_1 となったことに注意されたい．

問 9.10 前の例と同じ記号を用いる．純粋状態

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1^{(1)}\rangle|e_2^{(2)}\rangle - |e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle)$$

を考える．対応する密度行列を求めよ，次に，この密度行列の，1 番目の系に関する部分跡をとり，2 番目の系を表す密度行列を求めよ．また 2 番目の系に関する部分跡をとり，1 番目の系を表す密度行列を求めよ．

問 **9.11** 1 番目の系に作用する物理量を A とすると，全系 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ に作用する演算子は $A \otimes I_{d_2}$ である．ただし $d_2 = \dim \mathcal{H}_2$ である．このとき

$$\mathrm{tr}\,(\rho_1 A) = \mathrm{tr}\,(\rho(A \otimes I_{d_2})) \tag{9.53}$$

が成り立つことを示せ．

次に，2 体系の純粋状態の部分跡が他の系の混合状態を与えるのであれば，逆に混合状態が与えられたとき，余分な系を「加えて」(実際はヒルベルト空間のテンソル積をとる)，この混合状態が 2 体系における純粋状態の部分跡から導かれるようにできるであろうか？ 答えはイエスである．もともとの系と同じ次元の仮想的な系を加えれば，つねに部分跡がその混合状態となるような 2 体系の純粋状態が存在する．この純粋状態をつくり出す操作を純粋化という．

具体的にその純粋状態を構成しよう．考えている系のヒルベルト空間を $\mathcal{H}$，$d := \dim \mathcal{H}$ とし，任意の密度行列 ρ のスペクトル分解を $\rho = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ とする．$\{|\lambda_i\rangle\}$ は $\mathcal{H}$ の完全系を張る．さらに仮想的なヒルベルト空間を $\mathcal{H}$ のコピーにとる．全系は $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ である．$\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ におけるベクトル

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{d} \sqrt{\lambda_i}\, |\lambda_i\rangle \otimes |\mu_i\rangle \tag{9.54}$$

を定義しよう．ただし $\{|\mu_i\rangle\}$ は仮想的な系の任意の正規直交基底である．密度行列 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ の仮想系に関する部分跡をとると

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}_{\,2}|\Psi\rangle\langle\Psi| &= \sum_{i,j,k=1}^{d} (I_d \otimes \langle\mu_i|) \left[\sqrt{\lambda_j \lambda_k}\, |\lambda_j\rangle|\mu_j\rangle\langle\lambda_k|\langle\mu_k|\right] (I_d \otimes |\mu_i\rangle) \\
&= \sum_{k=1}^{d} \lambda_k |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k| = \rho
\end{aligned} \tag{9.55}$$

となり，ρ が再現される．

その構成法からもわかるように，純粋化は一意的ではない．以下の問 9.13 が示すように，与えられた密度行列に対し，純粋化は無数に存在する．

問 9.12　密度行列を $\rho = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ とする．ρ の純粋化の一つを求めよ．

問 9.13　$d = \dim \mathcal{H}$ とする．

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{d} \sqrt{\lambda_k}\,|\lambda_k\rangle \otimes |\mu_k\rangle$$

を $\rho = \sum_{k=1}^{d} \lambda_k |\lambda_k\rangle\langle\lambda_k| \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の純粋化の一つとする．ただし $\{|\mu_k\rangle\}$ は仮想系の正規直交基底の一つである．このとき，任意の $U \in \mathrm{U}(d)$ に対し

$$|\Psi'\rangle = \sum_{k=1}^{d} \sqrt{\lambda_k}|\lambda_k\rangle \otimes U|\mu_k\rangle$$

も ρ の純粋化になっていることを示せ．

9-4-5　忠 実 度

ある密度行列と別の密度行列の間の「近さ」が定義できれば，2 つの密度行列が近いか遠いか判断できる．例えば，実験家が密度行列の測定を行い，それが理論的な予測をどの程度再現しているか定量化するうえで，この距離は便利である．また，さまざまなエラーやノイズが密度行列を本来のものからどれだけ逸脱させたか定量化するのにも使うことができる．以下に定義する忠実度は，密度行列の間の近さのものさしとしてしばしば使われる [17].

定義 9.2　$\mathcal{S}(\mathcal{H})$ に属する 2 つの任意の密度行列 ρ_1 と ρ_2 がある．これらの間の忠実度は

$$F(\rho_1, \rho_2) := \mathrm{tr}\left(\sqrt{\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}}\right) \tag{9.56}$$

で定義される．ここに $\sqrt{\rho_1}$ は，その固有値がすべて正となるように選ぶものとする．

いくつかの注意をしよう．

- ρ_1 のスペクトル分解を $\rho_1 = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ としよう．ただし $d = \dim \mathcal{H}$ である．すると，定義から $\sqrt{\rho_1} = \sum_{i=1}^{d} \sqrt{\lambda_i}\,|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ となる．
- 同じ密度行列の間の忠実度は $F(\rho, \rho) = 1$ である．実際，

$$F(\rho,\rho) = \mathrm{tr}\left(\sqrt{\sqrt{\rho}\rho\sqrt{\rho}}\right) = \mathrm{tr}\,\rho = 1.$$

1 は忠実度の最大値で，相異なる密度行列の間の忠実度は 1 よりも小さい．(証明は [17] をみよ．) この意味で，忠実度は密度行列の間の「重なり具合」をみているといってもよい．

・定義から $F(\rho_1,\rho_2)$ は非負である．

例 9.11　上記の注意で，忠実度は状態の間の重なり具合を表すと述べた．純粋状態を考えると，忠実度は実際に波動関数の内積に帰着することをみよう．$\rho_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ および $\rho_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$ を 2 つの純粋状態とする．$\sqrt{\rho_i} = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \rho_i$ であるから，忠実度は

$$\begin{aligned}F(\rho_1,\rho_2) &= \mathrm{tr}\sqrt{|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi_1\rangle\langle\psi_1|}\\ &= |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|\mathrm{tr}|\psi_1\rangle\langle\psi_1| = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|\end{aligned}$$

となる．

例 9.12　特に，2 つの密度行列 $\rho_1,\rho_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ が可換であるとき，それらは同時対角化可能であり，同時固有ベクトルをもつ．$[\rho_1,\rho_2]=0$ として，$\rho_1 = \sum_{i=1}^{d}\lambda_i|e_i\rangle\langle e_i|$ および $\rho_2 = \sum_{i=1}^{d}\mu_i|e_i\rangle\langle e_i|$ を 2 つの密度行列のスペクトル分解とする．ここに $d=\dim\mathcal{H}$ で，$\{|e_i\rangle\}_{1\le i\le d}$ は正規直交化された同時固有ベクトルの集合で完全系を張る：$\rho_1|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle$，$\rho_2|e_i\rangle = \mu_i|e_i\rangle$．このとき，忠実度は

$$\begin{aligned}F(\rho_1,\rho_2) &= \mathrm{tr}\sqrt{\sum_{i,j,k=1}^{d}\sqrt{\lambda_i\lambda_k}\mu_j|e_i\rangle\langle e_i|e_j\rangle\langle e_j|e_k\rangle\langle e_k|}\\ &= \sqrt{\sum_{j=1}^{d}\lambda_j\mu_j}\end{aligned} \tag{9.57}$$

となる．

問 9.14　$\rho_1,\rho_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ で，$U \in \mathrm{U}(d)$ とする．ただし $d=\dim\mathcal{H}$ である．このとき

$$F(U\rho_1U^\dagger, U\rho_2U^\dagger) = F(\rho_1,\rho_2) \tag{9.58}$$

を示せ．したがって，系がユニタリー時間発展をする限り，忠実度はその初期値から変

化しない.

問 9.15 2つの密度行列を

$$\rho_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とする. このとき忠実度 $F(\rho_1, \rho_2)$ を求めよ.

9-5 エントロピー

古典情報理論でシャノン・エントロピーはおなじみであるが, 量子情報理論では, その対応物としてフォンノイマン・エントロピーが用いられる.

9-5-1 シャノン・エントロピー

エントロピーは確率分布のランダムさのものさしである. また, エントロピーはそのランダム変数の測定を行ったときに得られる情報を定量化する.

まず, 古典的なシャノン・エントロピーの復習からはじめよう.

有限集合 $\mathcal{X} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ の中に値をとる確率変数 X があり, それが値 x_k をとる確率を $p(x_k)$ とする. もちろん $\sum_{k=1}^{n} p(x_k) = 1$ である. すると, この確率分布のシャノン・エントロピー S は

$$S := -\sum_k p(x_k) \log_2 p(x_k)$$

と定義される. 以下, この節では特に断らない限り対数の底は 2 として, $\log_2$ を単に $\log$ と書く. 負号が付いていることから, S は非負である. また, $0 \log 0 = 0$ と約束する. いくつか特別の場合を考えよう.

(i) $x = x_1$ に対し $p(x_1) = 1$ で, $k \neq 1$ に対して $p(x_k) = 0$ の場合, 定義から $S = -1 \log 1 = 0$ となる. これはシャノン・エントロピーの最小値である.

(ii) x_k のとりうる値が n 通りあり, 確率分布が一様, すなわち $p(x_k) = 1/n$ の場合は

$$S = -n\frac{1}{n}\log\frac{1}{n} = \log n$$

となる．これは S がとりうる最大値である．実際，S に $\sum_{k=1}^{n} p(x_k) = 1$ の拘束条件のもとで極値をとらせる $p(x_k)$ を求めよう．ラグランジュの未定乗数を λ として，$-\sum_{k=1}^{n} p(x_k)\log p(x_k) - \lambda\left(\sum_{k=1}^{n} p(x_k) - 1\right)$ の極値問題を考える．$p(x_k)$ に関する変分 $\delta p(x_k)$ のもとで

$$\delta S = -(\log p(x_k) + 1 + \lambda)\delta p(x_k) = 0$$

から, $p(x_k) = 2^{-1-\lambda}$ は k に依存しないことがわかる．規格化条件 $\sum_{k=1}^{n} p(x_k) = 1$ から $\lambda = \log n - 1$ が求められ，これを代入すると $p(x_k) = 1/n$ が示される．一般の $\mathcal{X} = \{p(x_k)\}$ に関しては $0 \le S \le \log n$ が成り立つ.

例 9.13　(1)　コイン投げを考えよう．一様なコインは H(表) か T(裏) を確率 1/2 でとるものとする．この確率過程のエントロピーは

$$S = -2 \times (1/2)\log(1/2) = \log 2 = 1$$

である．どちらかの面が出たかの情報を保存するのに必要なビットは 1 ビットである.

(2) 一様なサイコロを振ることを考えよう．その結果は確率 1/6 で $1, 2, \ldots, 6$ のうちのどれか 1 つである．この確率過程のエントロピーは

$$S = -6 \times (1/6)\log(1/6) = \log 6 = 2.58\ldots$$

である．どの目が出たかの情報を保存するのに必要なビット数は 3 ビットである.

エントロピー S は加法的である．有限集合 $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$ に値をとる 2 つの独立な確率変数を X, Y とし，$p(x_j)$ と $q(y_k)$ をそれぞれの確率分布とすると，X と Y の測定により x_j, y_k が得られる確率は $p(x_j)q(y_k)$ であるから，この確率過程のエントロピーは

$$S = -\sum_{j,k} p(x_j)q(y_k)\log p(x_j)q(y_k)$$

$$
\begin{aligned}
&= -\sum_{j,k} p(x_j)q(y_k)[\log p(x_j) + \log q(y_k)] \\
&= -\sum_{j} p(x_j)\log p(x_j) - \sum_{y_k} q(y_k)\log q(y_k) \qquad (9.59)
\end{aligned}
$$

となる．したがって，全エントロピーは，X, Y それぞれのエントロピーの和となり，加法性が示された．

9-5-2 フォンノイマン・エントロピー

ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^d$ をもつ量子系を考えよう．この系の状態が密度行列 ρ で表されるとしよう．このとき，ρ のフォンノイマン・エントロピーを

$$
S(\rho) := -\mathrm{tr}\,(\rho\log\rho)
$$

で定義する．古典の場合と同じく $\log$ は $\log_2$ を意味する．

再び，2 つの極端な例を考えよう．

(i) 純粋状態を $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ とする．もし $|\psi\rangle$ をヒルベルト空間 $\mathbb{C}^d$ の一つの基底ベクトルとして用いると ρ は $\rho = \mathrm{diag}(1, 0, \ldots, 0)$ と表され，エントロピーは $S(\rho) = -\mathrm{tr}\,(\rho\log\rho) = 0$ となる．これはフォンノイマン・エントロピーの最小値である．

(ii) 一様混合状態は，すべての独立な正規直交状態が同じ確率で混合している状態である．その行列表示は座標系にかかわらず $\rho = I_n/n$ で与えられる．ρ のフォンノイマン・エントロピーは

$$
S(\rho) = -n(1/n)\log(1/n) = \log n
$$

となる．これは S がとりうる最大値である．それを証明しよう．そのために，拘束条件 $\mathrm{tr}\ \rho = 1$ を考慮して $\widetilde{S}(\rho) = -\mathrm{tr}\,(\rho\log\rho) - \lambda(\mathrm{tr}\,\rho - 1)$ の極値問題を考える．ここに λ はラグランジュの未定乗数．すると，変分 $\delta\rho$ のもとで $\delta\widetilde{S}(\rho) = -\mathrm{tr}\,[(\log\rho + 1 + \lambda)\delta\rho] = 0$ が得られる．これから $\rho = 2^{-1-\lambda}I_n$ が導かれる．未定乗数 λ は束縛条件 $\mathrm{tr}\,\rho = 1$ から決まり，$\lambda = \log n - 1$ となる．これを用いて $\rho = I_n/n$ が示された．一般の状態 ρ に対しては $0 \le S(\rho) \le \log n$ が成り立つ．

ここで $\rho = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ を ρ のスペクトル分解とすると，フォンノイマン・エントロピーはこれを用いて

$$S(\rho) = -\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \log \lambda_i$$

と表される．ρ の非負性から $\lambda_i \geq 0$ に注意されたい．

問 9.16 次の各状態のフォンノイマン・エントロピーを求めよ：

$$\rho_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad \rho_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2 体系の密度行列から部分跡で得られる密度行列のエントロピーはおもしろい性質を満たす．

定理 9.2 2 体系を考え，そのヒルベルト空間を $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ とし，この系の任意の純粋状態を $|\psi\rangle$ とする．ただし $d_a = \dim \mathcal{H}_a$ $(a = 1, 2)$ である．$\rho_1 = \mathrm{tr}_2 |\psi\rangle\langle\psi|$, $\rho_2 = \mathrm{tr}_1 |\psi\rangle\langle\psi|$ とすると ρ_1 と ρ_2 のエントロピーは等しい．

証明： $|\psi\rangle$ のシュミット分解を

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{r} \sqrt{s_i}\, |f_i^{(1)}\rangle |f_i^{(2)}\rangle$$

とする．ここで r は $|\psi\rangle$ のシュミット・ランクである．$\mathcal{H}_1$ の正規直交基底を

$$\{|f_1^{(1)}\rangle, \ldots, |f_r^{(1)}\rangle, |e_{r+1}^{(1)}\rangle, \ldots, |e_{d_1}^{(1)}\rangle\},$$

$\mathcal{H}_2$ の正規直交基底を

$$\{|f_1^{(2)}\rangle, \ldots, |f_r^{(2)}\rangle, |e_{r+1}^{(2)}\rangle, \ldots, |e_{d_2}^{(2)}\rangle\}$$

ととる．ここに $\{|e_{r+1}^{(a)}\rangle, \ldots, |e_{d_a}^{(a)}\rangle\}$ は $\{|f_1^{(a)}\rangle, \ldots, |f_r^{(a)}\rangle\}$ とともに $\mathcal{H}_a$ の正規直交基底を構成する．この基底で部分跡をとると

$$\rho_1 = \mathrm{tr}_2 |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{i=1}^{r} s_i |f_i^{(1)}\rangle\langle f_i^{(1)}|,$$

$$\rho_2 = \mathrm{tr}_1 |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{i=1}^{r} s_i |f_i^{(2)}\rangle\langle f_i^{(2)}|$$

が得られる．したがって，$S(\rho_1) = S(\rho_2) = -\sum_{i=1}^{r} s_i \log s_i$ が示された． ∎

この定理は純粋状態に対してのみ成り立ち，一般の混合状態に対しては成り立たない．部分跡で得られた部分系のエントロピーをエンタングルメント・エントロピーといい，最近の物理学では量子重力から物性論まで活発に研究されている [18].

上記の定理から明らかなように，テンソル積で表される純粋状態は $r = 1$, $s_1 = 1$, $s_i = 0$ $(i \neq 1)$ を満たすので，エンタングルメント・エントロピーは 0 となる．純粋状態におけるエンタングルメント・エントロピーはエンタングルメントの有無を表している．

例 9.14 $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ とし，例 9.5 のベクトル

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(i|e_1^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle + |e_2^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle + i|e_2^{(1)}\rangle|e_1^{(2)}\rangle + |e_2^{(1)}\rangle|e_3^{(2)}\rangle)$$

をとる．このとき，部分系のエンタングルメント・エントロピーを求めよ．

解答： 例 9.5 の結果から $|\psi\rangle$ のシュミット分解は

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|f_1^{(1)}\rangle|f_1^{(2)}\rangle + |f_2^{(1)}\rangle|f_2^{(2)}\rangle)$$

で与えられる．$|f_k^{(a)}\rangle$ の具体的な形は求められるが，ここでは必要ではない．この分解から

$$\rho_1 = \mathrm{tr}_2|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \qquad \rho_2 = \mathrm{tr}_1|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

が得られる．したがって $S(\rho_1) = S(\rho_2) = 2 \times 1/2 \times \log_2 2 = 1$ となる． ∎

熱力学に現れるエントロピーと異なり，純粋状態のエンタングルメント・エントロピーは部分系の大きさによらないことに注意されたい．

次の章では，量子系を情報処理に応用する基礎を学ぶ．

関 連 図 書

[1] P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics* (4th ed.), Clarendon Press (1981).

[2] L. I. Shiff, *Quantum Mechanics* (3rd ed.), McGraw-Hill (1968).

[3] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Dover (2000).

[4] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (2nd Edition), Addison Wesley (1994).

[5] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, World Scientific (1998).
[6] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, Springer (1995).
[7] E. H. Kennard, Z. Phys. **44**, 326 (1927).
[8] H. P. Robertson, Phys. Rev. **34** 163, (1929).
[9] B. Pontecorvo, Soviet Physics JETP **7**, 172 (1958).
[10] Z. Maki, M. Nakagawa and S. Sakata, Prog. Theor. Phys. **28**, 870 (1962).
[11] R. Horodecki *et al.*, eprint, quant-ph/0702225 (2007).
[12] C. H. Bennett *et al.*, Phys. Rev. A **59**, 1070 (1999).
D. P. DiVincenzo, D. W. Leung and B. M. Terhal, IEEE Trans. Info. Theory **48**, 580 (2002).
[13] A. Peres, Phys. Rev. Lett. **77**, 1413 (1996).
[14] M. Horodecki *et al.*, Phys. Lett. A **223**, 1 (1996).
[15] G. Vidal, J. Mod. Opt. **47**, 355 (2000).
[16] P. Horodecki, Phys. Lett. A **232**, 333 (1997).
[17] A. Uhlmann, Rep. Math. Phys. **9**, 273 (1976).
R. Jozsa, J. Mod. Opt. **41**, 2315 (1994).
Christopher A. Fuchs, eprint, arXiv:quant-ph/9601020 (1996).
[18] 高柳匡，別冊数理科学「ホログラフィー原理と量子エンタングルメント」，サイエンス社 (2014).

10. 量子ビット

10-1　量子ビット

現在のディジタル技術は，0 と 1 の 2 つの値をとる「ビット」を情報の単位とする．ビットの 0 と 1 が物理的に何を表すかは，ビットを表す物理系に依存する．半導体を使えば，例えばビット 0 は電圧 0 V で表され，ビット 1 は 5 V で表される．白い碁石を 0，黒い碁石を 1 としてもよい．

一方，量子情報では「量子ビット」とよばれる 2 次元複素ベクトル空間の単位ベクトルを情報の単位とする．量子ビットに関してより詳しい解説は，例えば [1, 2, 3] などを参照されたい．

10-1-1　1 量子ビット

量子ビットは $\mathbb{C}^2$ の単位ベクトルで表される．$\mathbb{C}^2$ の正規直交基底を $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ とする．$|e_0\rangle, |e_1\rangle$ と書かないのは，ビットの $0, 1$ との対応を考慮しているからである．通常，

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{10.1}$$

と成分表示するが，これは σ_z の固有ベクトルを用いたもので，必ずしもこの表し方に限る必要はない．例えば，σ_x の固有ベクトルを使って

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{10.2}$$

という成分表示のほうが便利である場合もある．要は，互いに直交する単位ベクトルの組であれば何でもよい．

実際にこれらの基底ベクトルがどのような量子状態に対応するかは，それを実現する物理系に依存する．例えば，スピン 1/2 の原子核や電子は，スピンの角運動量が上向きと下向きの 2 つの状態をとりうる．このとき，上向き角運動量状態 $|\uparrow\rangle$ を $|0\rangle$ に，下向き角運動量状態 $|\downarrow\rangle$ を $|1\rangle$ に対応させることができる．また，光子の電場は進行方向と垂直な方向に振動するが，その方向が水平 (水平偏光) か鉛直 (垂直偏光) かで 2 つの可能性がある．例えば，水平偏光状態 $|\mathrm{H}\rangle$ を $|0\rangle$ に，鉛直偏光状態 $|\mathrm{V}\rangle$ を $|1\rangle$ にとれば，量子ビットを表す基底ベクトルになる．

いずれにせよ，量子情報処理を実行するには，量子ビットを記述する基底ベクトルを導入しなければならない．場合によっては，2 組以上の基底ベクトルを導入しなければならない．以下，物理系とは独立に，基底ベクトル $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を抽象的に考えることにする．

まえに述べたように，量子情報処理を行うにあたり，$|0\rangle$ を古典ビットの 0 に，$|1\rangle$ を 1 に対応させることが多い．しかし，古典ビットと異なり，量子ビットは 0 と 1 の重ね合わせ状態

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \qquad (a, b \in \mathbb{C},\ |a|^2 + |b|^2 = 1) \tag{10.3}$$

をとることができる．いわば，同時に 0 と 1 の値をとるのである．これは，古典的にはありえない状態である．

しかし，ここでひとつ注意が必要である．量子力学の要請によると，$|\psi\rangle$ が $|0\rangle$ か $|1\rangle$ か観測すると結果は，確率 $|a|^2$ ($|b|^2$) で $|0\rangle$ が ($|1\rangle$ が) 観測され，観測直後の状態は $|0\rangle$ に ($|1\rangle$ に) 決まってしまう．したがって，量子ビットは無限にたくさんの状態をとりうるものの，観測によりそれから得られる情報は，古典的なビットと同じく 0 か 1 の 2 種類しかない．いま，未知の量子ビットの状態を $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ としよう．この状態をたくさんコピーして，それを何度も観測すれば，0 が得られる確率が $|a|^2$ で，1 が得られる確率が $|b|^2$ であることから，a, b または，少なくとも $|a|, |b|$ は推定できると思われるかもしれないが，後に述べる「ノー・クローニング定理」により，未知の量子状態をユニタリー変換ではコピーすることはできないので，これもできない．

10-1-2　ブロッホ球面

1 量子ビットの状態の可視化を考えよう．$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ とする．$|\psi\rangle$ と $e^{i\alpha}|\psi\rangle$ は同じ状態を表すので，一般性を失うことなく a は実数にとることができる．一方，規格化条件から $\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$ であるから

$$a = \cos\frac{\theta}{2},\ b = e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \qquad (0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi) \tag{10.4}$$

とおくことができる．θ を 2 で割ってあるのは不自然にみえるかもしれないが，その理由は下に明らかにする．以下，1 量子ビットの状態を

$$|\psi(\theta,\phi)\rangle := \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \tag{10.5}$$

と表す．

$\theta/2$ の理由を明らかにするために，$|\psi(\theta,\phi)\rangle$ が，スピン・ベクトル演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ を $\widehat{\boldsymbol{n}}$ 方向に射影した行列 $\widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)\cdot\boldsymbol{\sigma}$ の固有値 $+1$ の固有ベクトルであることを示す．ただし

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad \widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi) = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)^t$$

である．このベクトル $\widehat{\boldsymbol{n}}$ をブロッホ・ベクトルという．実際，

$$\begin{aligned}
\widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)\cdot\boldsymbol{\sigma}|\psi(\theta,\phi)\rangle &= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\cos\theta + \sin\frac{\theta}{2}\sin\theta \\ e^{i\phi}\left(\cos\frac{\theta}{2}\sin\theta - \cos\theta\sin\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = |\psi(\theta,\phi)\rangle
\end{aligned}$$

となり，$|\psi(\theta,\phi)\rangle$ が行列 $\widehat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ の固有値 1 の固有ベクトルであることが示された．単位ベクトル $\widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)$ は単位球面上の点を表すが，この点を 1 量子ビット状態 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$ に対応させることは自然である．この球面をブロッホ球面という．θ と ϕ のとりうる範囲は $0 \le \theta \le \pi$ および $0 \le \phi < 2\pi$ に制限されているので，この対応は 1 対 1 である．

問 10.1　$|\psi(\theta,\phi)\rangle$ を，(10.5) で与えられるベクトルとする．このとき

$$\langle\psi(\theta,\phi)|\boldsymbol{\sigma}|\psi(\theta,\phi)\rangle = \widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi) \tag{10.6}$$

となることを示せ．ただし $\widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)$ は上記に定義したブロッホ・ベクトルである．

この問からも，$|\psi(\theta,\phi)\rangle$ においてスピンは $\widehat{\boldsymbol{n}}(\theta,\phi)$ の方向を「向いている」ことがわかるであろう．

次に混合状態を調べよう．1 量子ビットの密度行列 ρ は，単位球体 (単位球面の内部) で表されることを示す．すでにみたように，ρ は固有値が非負のエルミート行列で，その跡は 1 であるが，その一般形は

$$\rho = \frac{1}{2}\left(I_2 + \sum_{i=x,y,z} u_i\sigma_i\right) \quad (u_i \in \mathbb{R}) \tag{10.7}$$

で与えられる．$u_i \in \mathbb{R}$ は ρ のエルミート性から直ちに導かれる．$\mathrm{tr}\,\rho = 1$ であることは，$\mathrm{tr}\,\sigma_i = 0$ と $\mathrm{tr}\,I_2 = 2$ から明らかであろう．u_i を成分とする実ベクトルを $\boldsymbol{u}$ とする．$|\boldsymbol{u}| \leq 1$ を示そう．ρ の固有値は

$$\lambda_+ = \frac{1}{2}\left(1+\sqrt{|\boldsymbol{u}|}\right), \quad \lambda_- = \frac{1}{2}\left(1-\sqrt{|\boldsymbol{u}|}\right) \tag{10.8}$$

であるが，これらは非負でなければならない．$\lambda_+ > 0$ は明らかであるが，$\lambda_- \geq 0$ であるためには $|\boldsymbol{u}| \leq 1$ でなければならない．したがって，$\boldsymbol{u}$ のとりうる範囲は単位球の内部となる．この球をブロッホ球面と区別して，ブロッホ球体とよぼう．$|\boldsymbol{u}| = 1$ のときは，固有値 λ_- は 0 となり，ρ の階数は 1，すなわち純粋状態となる．以前にみたように，ブロッホ球体の表面，すなわちブロッホ球面は純粋状態を表す．混合状態に対しても，ベクトル $\boldsymbol{u}$ をブロッホ・ベクトルとよぶことにする．

問 10.2　純粋状態 (10.5) の密度行列を求め，それを (10.7) の形に書け．

問 10.3　(10.7) で与えられる密度行列に対し

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \mathrm{tr}\,(\rho\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{u} \tag{10.9}$$

を示せ．これは問 10.1 の結果の一般化である．

10-2　多量子ビット状態とエンタングルメント

以下，純粋状態を主に扱う．n 個の量子ビットからなる系を考えよう．複数の成分からなる系は，古典的な系とまったく異なる振る舞いをすることはすでに 9-3 節で学んだ．ここでは，量子ビットに話を限り補足を行う．この

多成分量子系と古典系の振る舞いの違いが，量子計算と古典計算に大きな差をもたらすのである．一組の n 量子ビット系を量子計算では量子レジスタとよぶこともある．

古典的な n 個のビット列を考える．このレジスタの状態は，例えば $1101\ldots01$ のように，各ビットの状態 $0, 1$ を指定すれば完全に決定できる．しかし，量子系では必ずしもこのように各量子ビットの状態を与えて決定できる状態ばかりとは限らないことはすでに 9-3 節で学んだ．

例えば，n 量子ビット・レジスタを考える．各量子ビットの純粋状態が $|\psi_i\rangle = a_i|0\rangle + b_i|1\rangle$ のように表されると，全体としては，9-3 節で導入されたテンソル積状態

$$|\Psi\rangle = (a_1|0\rangle + b_1|1\rangle) \otimes (a_2|0\rangle + b_2|1\rangle) \otimes \cdots \otimes (a_n|0\rangle + b_n|1\rangle)$$

となる．この状態を指定する変数 $\{a_i, b_i\}$ の数は，規格化を無視すると $2n$ 個の複素数，規格化を考えるとブロッホ球面のパラメータ $\{(\theta_i, \phi_i)\}_{1\leq i\leq n}$ を使って $2n$ 個の実数で表される．

一方，n 量子ビット・レジスタを完全に量子力学的に扱うと，テンソル積状態の重ね合わせ状態も考慮しなければならない．したがって，もっとも一般的な純粋状態は，$\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を各量子ビットの基底として

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_k\in\{0,1\}} a_{i_1 i_2 \ldots i_n}|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \cdots \otimes |i_n\rangle \tag{10.10}$$

と展開することができる．一般に，この状態はテンソル積で表すことができるとは限らない．テンソル積に書くことができない状態を，9-3 節で学んだようにエンタングル状態という．

n 量子ビット・レジスタの一般の状態を指定するのに必要なパラメータの数を求めよう．規格化を無視すると，(10.10) には 2^n 個の複素数 $\{a_{i_1,\ldots,i_n}\}_{i_k\in\{0,1\}}$ が含まれている．一方，規格化を考えると，これらの複素数は一つの式 $\sum_{i_k\in\{0,1\}} |a_{i_1,\ldots,i_n}|^2 = 1$ を満たし，かつ全体の位相は意味をもたないので，独立な自由度は 2 つ減り，$(2\times 2^n - 2)$ 個の実数パラメータをもつことになる．n が大きくなると，2^n は $2n$ に比べ桁違いに大きくなる．比 $2^n/2n$ は，$n = 100$ のときは $\sim 6.3\times 10^{27}$，$n = 1000$ のときは $\sim 5.4\times 10^{297}$ と天文学

的な数になる[1)]．これらの膨大な比は，n が大きくなるにつれて，量子レジスタを表すベクトル空間のベクトルのうちテンソル積で表される部分は，ほんのわずかの部分にすぎないことを意味する．ほとんどすべての状態はエンタングルしているのである．もし，量子系で情報処理や計算を行うのに，古典系と同じように各量子ビットの状態に分けて考えられるテンソル積状態しか使わないのであれば，それは膨大な資源のなかの無視できるごく一部しか利用しないことになる．量子コンピュータが古典コンピュータに比べ「指数関数的にパワフルである」と表現されるのは，古典的には存在しないエンタングル状態を計算資源として使うことができるからである．

話を具体的にするために 2 量子ビット系を考えよう．この系の基底ベクトルは，(10.10) から $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ で与えられる．この基底は $0 \sim 3 = 2^2 - 1$ を 2 進数で表したもので，**2 進数基底ベクトル**とよぶこともある．$|0\rangle = (1, 0)^t$, $|1\rangle = (0, 1)^t$ として，具体的に成分を書くと

$$|00\rangle = (1, 0, 0, 0)^t, \quad |01\rangle = (0, 1, 0, 0)^t,$$

$$|10\rangle = (0, 0, 1, 0)^t, \quad |11\rangle = (0, 0, 0, 1)^t$$

となる．(このことは，各自確かめよ．)

より一般に n 量子ビット・レジスタを考え，その基底は $\{|b_{n-1}b_{n-2}\ldots b_0\rangle\}$ と書かれる．ただし $b_{n-1}, b_{n-2}, \ldots, b_0 \in \{0, 1\}$ である．$|b_{n-1}b_{n-2}\ldots b_1b_0\rangle$ は，$(b_{n-1}2^{n-1} + b_{n-2}2^{n-2} + \cdots + b_1 2 + b_0)$ 番目の成分が 1 で，それ以外の成分はすべて 0 である．場合によっては基底ベクトルを 10 進数で表すこともある．$b_{n-1}2^{n-1} + b_{n-2}2^{n-2} + \cdots + b_0 = x$ のとき，$|b_{n-1}b_{n-2}\ldots b_0\rangle$ の代わりに $|x\rangle$ と書くことにする．例えば，上記にあげた 2 量子ビット系で $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ の代わりに $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ と書く．どちらの記法が使われているかは，前後の文脈から明らかであろう．n 量子ビット系では，基底ベクトルは $|0\rangle = |000\ldots00\rangle$ から $|2^n - 1\rangle = |111\ldots1\rangle$ まで $2^n = \exp(n \ln 2)$ 個ある．

2 量子ビット系では，しばしば基底ベクトル

1) 観測可能な宇宙の中にある原子の数は，大まかに 10^{80} 程度と見積もられている．本文に述べた比がいかに大きいか見当がつくであろう．

$$\left\{\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad |\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \quad |\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \end{aligned}\right\} \tag{10.11}$$

が用いられる．これらが正規直交基底であることは直ちに確かめられる．この基底をベル基底，また各ベクトルをベル・ベクトルまたはベル状態という．すべてのベル・ベクトルはエンタングルしている．

問 10.4 2 進数基底 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ をベル基底 $\{|\Phi^+\rangle, |\Phi^-\rangle, |\Psi^+\rangle, |\Psi^-\rangle\}$ に変換するユニタリー行列を求め，成分を具体的に書き下せ．また，その逆行列を求めよ．

問 10.5 各ベル状態における，演算子 $\sigma_x \otimes \sigma_x$，$\sigma_x \otimes \sigma_z$ の期待値を求めよ．

10-3 測　　定

量子力学の公理で学んだように，状態 $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ において，系が $|0\rangle$ にあるか $|1\rangle$ にあるか観測すると，確率 $|a|^2$ ($|b|^2$) で $|0\rangle$ ($|1\rangle$) にあることが観測され，その直後の状態は $|0\rangle$ ($|1\rangle$) である．

では，多量子ビット系における観測とはどのようなものだろうか？ 量子ビットが複数ある場合に，その結果はどの量子ビットから測定するかという，測定の順序に依存するのだろうか？ 話を具体的にするために，2 量子ビット系を考える．2 量子ビットのもっとも一般的な純粋状態は

$$|\Psi\rangle = c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle \tag{10.12}$$

で与えられる．ただし $|c_0|^2 + |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ である．まず，第 1 量子ビットを測定する．

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |0\rangle(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) + |1\rangle(c_2|0\rangle + c_3|1\rangle) \\ &= \sqrt{|c_0|^2 + |c_1|^2}\,|0\rangle \frac{1}{\sqrt{|c_0|^2 + |c_1|^2}}(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \\ &\quad + \sqrt{|c_2|^2 + |c_3|^2}\,|1\rangle \frac{1}{\sqrt{|c_2|^2 + |c_3|^2}}(c_2|0\rangle + c_3|1\rangle) \end{aligned}$$

と変形すると，

$$|0\rangle \frac{1}{\sqrt{|c_0|^2+|c_1|^2}}(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle), \quad |1\rangle \frac{1}{\sqrt{|c_2|^2+|c_3|^2}}(c_2|0\rangle + c_3|1\rangle)$$

は規格化されていることから，第 1 量子ビットの測定値が 0 である確率は

$$p_0 = |c_0|^2 + |c_1|^2, \tag{10.13}$$

1 である確率は

$$p_1 = |c_2|^2 + |c_3|^2 \tag{10.14}$$

であることがわかる．第 1 量子ビットの測定値が 0 のとき，その直後 第 2 量子ビットを測定すると，確率 $|c_0|^2/(|c_0|^2+|c_1|^2)$ で 0 が，$|c_1|^2/(|c_0|^2+|c_1|^2)$ で 1 が得られる．同様に，第 1 量子ビットの測定値が 1 のとき，その直後 第 2 量子ビットを測定すると，確率 $|c_2|^2/(|c_2|^2+|c_3|^2)$ で 0 が，$|c_3|^2/(|c_2|^2+|c_3|^2)$ で 1 が得られる．

まとめると，第 1 量子ビットを測定した後，第 2 量子ビットを測定したとき，その結果が (i,j) である確率は

$$\begin{aligned}
(0,0); &\quad (|c_0|^2+|c_1|^2)\frac{|c_0|^2}{|c_0|^2+|c_1|^2} = |c_0|^2, \\
(0,1); &\quad (|c_0|^2+|c_1|^2)\frac{|c_1|^2}{|c_0|^2+|c_1|^2} = |c_1|^2, \\
(1,0); &\quad (|c_2|^2+|c_3|^2)\frac{|c_2|^2}{|c_2|^2+|c_3|^2} = |c_2|^2, \\
(1,1); &\quad (|c_2|^2+|c_3|^2)\frac{|c_3|^2}{|c_2|^2+|c_3|^2} = |c_3|^2
\end{aligned} \tag{10.15}$$

となる．測定の順序を変え，第 2 量子ビットから測定をはじめても，最終的な観測確率は上記と同じになる．一般に，多量子ビット系での量子ビットの測定結果は，測定する量子ビットの順序によらない．

多量子ビット系における測定は，エンタングル状態に新たな見方を与える．例として，まずテンソル積状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)|0\rangle$$

を考えよう．第 1 量子ビットを測定すると確率 1/2 で 0 が，確率 1/2 で 1 が測定される．次に第 2 量子ビットを測定すると，第 1 量子ビットの測定値に

かかわりなく，つねに 0 が得られる．これは順序を変えてもそうである．一般にテンソル積状態では，ある量子ビットの測定値と，他の量子ビットの測定値の間には相関はない．

一方，エンタングル状態

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

を考えよう．第 1 量子ビットを測定すると，確率 1/2 で $|0\rangle$ が測定され，状態は $|00\rangle$ に，確率 1/2 で $|1\rangle$ が測定され，状態は $|11\rangle$ になる．その後，第 2 量子ビットを測定すると，第 1 量子ビットの測定値が 0 のときは必ず 0 が，1 のときは必ず 1 が測定される．測定の順序を変えてもこの事実，一方が 0 (1) であれば他方も 0 (1)，は変わらない．このように，エンタングル状態では，ひとつの量子ビットの測定値と他の量子ビットの測定値の間に強い相関がある．

10-4 ノー・クローニング定理

古典情報の世界では，データのコピーはごくありふれた操作である．ハードディスクがクラッシュしたときのために，データのバックアップは日常行われているし，またデータを盗むときには，それを隠すためにそのデータをコピーして，もとの場所には同じデータを残しておく．一方，量子情報の特徴として，未知の量子状態をコピーすることはできない．量子状態が既知であれば，コピーなど必要ではなく，その状態をつくり出せばよい．未知であることが重要なのである．これは量子情報に制限を与えているように思われるかもしれないが，それにより絶対安全な暗号システムを作ることができ，応用面でも重要である．

定理 10.1 (ノー・クローニング定理) 未知の量子状態をユニタリー行列でコピーすることは不可能である．

証明：そのようなユニタリー行列 U が存在すると矛盾が起きることを示す．「コピー行列」U は

$$U|\psi\rangle|\psi_0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle$$

と作用する．$|\psi_0\rangle$ は任意に決めたコピー先の初期状態である．そこで，$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$

という重ね合わせ状態を考えよう．以下の議論で規格化は重要ではないので，無視する．この $|\psi\rangle$ に関し

$$U|\psi\rangle|\psi_0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle$$

であるが，一方，U の線形性から

$$U|\psi\rangle|\psi_0\rangle = U(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)|\psi_0\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle$$

となり，同等であるべき 2 つの右辺は一致しない．この矛盾は，「コピー行列」U が存在すると仮定したからで，したがって，このような U は存在しない．　∎

定理の証明のポイントに重ね合わせ状態があるように，この定理は古典情報と無縁の状態がコピーできないといっているにすぎない．コピーの対象を限ればクローンをつくることはできる．実際，

$$|0\rangle|0\rangle \mapsto |0\rangle|0\rangle, \quad |1\rangle|0\rangle \mapsto |1\rangle|1\rangle \tag{10.16}$$

を与えるユニタリー行列 U_{C} を考えよう．このような U_{C} は

$$U_{\mathrm{C}} = |00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 10| + \cdots$$

と書かれる．ここで $\cdots$ は U_{C} をユニタリー行列にするために必要で，例えば

$$U_{\mathrm{C}} = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11| \tag{10.17}$$

となる．仮定により，U_{C} が作用するベクトルは $|00\rangle$ と $|10\rangle$ に限られるので，それ以外のベクトルに対する作用は意味がない．U_{C} を行列の形で書くと

$$U_{\mathrm{C}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.18}$$

となる．これは量子情報では制御 **NOT** ゲートとして知られている．名前の由来は，U_{C} が

$$U_{\mathrm{C}} = |0\rangle\langle 0| \otimes I_2 + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x \tag{10.19}$$

と書けるからで，第 1 量子ビット (制御ビット) が $|0\rangle$ のときは，第 2 量子ビット (ターゲットビット) には何もしない (I_2) が，第 1 量子ビットが $|1\rangle$ のときは，第 2 量子ビットを反転 ($\sigma_x : |0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$) する．

10-5 アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン現象

10-5-1 アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン・パラドックス

アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン (EPR) は，量子力学が不完全な理論であると主張する目的で，ある思考実験を提唱した [6]．もともとの論文は大変哲学的で，原題も「物理的実在の量子力学的記述は完全と思われるか？ (Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?)」となっているが，ここでは，以下の議論を進めるうえで有用な別の解釈を紹介する．それによると，エンタングル状態の存在は，光速を超えるものはないという特殊相対性理論と矛盾する結論を導くように思われる．これをアインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン (EPR)・パラドックスという．皮肉にも EPR パラドックスは，量子力学のもっとも重要な特徴を明らかにした．

ある粒子源が，ベル状態

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

を生成するとしよう．この状態を特に **EPR** 対または **EPR** 状態とよぶこともある．図 10.1 のように，生成された 2 つの粒子の 1 つ目の量子ビットはアリスに，2 つ目の粒子はボブに送られる[2)]．アリスとボブは数万光年離れていてもよい．アリスは彼女の受け取った粒子を測定し 0 または 1 の測定結果を得る．アリスの測定結果により，EPR 状態は $|01\rangle$ (アリスが 0 を測定した場合)，または $|10\rangle$ (アリスが 1 を測定した場合) に「波束の収縮」を起こす．そこで，ボブが自分の量子ビットを測定すると，前者の場合は必ず 1 を，後者の場合は必ず 0 を測定し，それ以外の可能性は皆無である．状態の変化



図 10.1 中央の粒子源から EPR 対が生成され，1 つ目の量子ビットはアリスへ，2 つ目の量子ビットはボブへ送られる．

2) アリスとボブは，情報理論でしばしば現れる登場人物である．

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \ \rightarrow \ |01\rangle, \text{ または } |10\rangle \tag{10.20}$$

は，アリスとボブがどんなに離れていても瞬時に起こる．これは一見，アリスが自分の量子ビットを測定したという情報が，特殊相対性理論に従わず数万光年の距離を一瞬に伝わりボブの測定に影響を与えたかのようにみえる．しかし，何が伝わったかよく考えよう．じつは，アリスが測定しても何もアリスからボブには伝わっていない．エネルギーが伝わっていないことは明白である．では情報はどうであろうか？ もし情報を伝えることができれば，数万光年の距離を瞬時にとどく通信が可能となる．しかし，これはできない．アリスの読みはランダムである．またボブの読みもランダムである．上記でみたように，このランダムな読みの間には強い相関がある．すなわち，アリスの 0, 1 とボブの 0, 1 はつねに反対の結果となっている．これで有意義な情報が送れるだろうか？ 答えはノーである．アリスは自分の，したがってボブの読みを制御することはできない．アリスは自分の測定結果から，ボブの結果を 100％ の精度で知ることができるが，それを利用して意味のある通信をすることはできないのである．意味のある情報を瞬時に送ることができれば，もちろんそれは特殊相対性理論に反してしまう．

このように，EPR の主張はパラドックスではなく，実際に起こる現象であり，実験的にも確かめられている．それゆえ最近は，かつての EPR パラドックスという名前は使われなくなり，むしろアインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン (EPR) 現象という言葉が使われる傾向にある．

10-5-2 アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン現象とノー・クローニング定理

EPR 現象と特殊相対性理論を利用すると，ノー・クローニング定理に別の証明を与えることができる [7].

アリスとボブは EPR 対

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

を共有しているとする．アリスは第 1 量子ビット，ボブは第 2 量子ビットをもっている．アリスが第 1 量子ビットを観測した後，ボブは手元の第 2 量子

ビットをつねに $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の基底で観測する．アリスがビット 0 を送りたいときは，自分の手元の第 1 量子ビットを $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の基底で観測する．その結果は $|0\rangle$ ($|1\rangle$) で，ボブはそれぞれの場合に $|1\rangle$ ($|0\rangle$) を確率 1 で観測する．次にアリスが 1 を送りたいときは，基底

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

で観測する．容易に示されるように，$|\Psi^-\rangle$ は

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle - |+-\rangle)$$

とも表すことができる．アリスが自分の量子ビットを観測したときの結果は $|+\rangle$ ($|-\rangle$) で，そのときボブの量子ビットは $|-\rangle$ ($|+\rangle$) に確定する．ボブがこの状態を $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の基底で観測すると，結果は $|0\rangle$ か $|1\rangle$ のどちらかが確率 $1/2$ で観測される．いずれにせよ，1 回の測定では，ボブは $|0\rangle$ か $|1\rangle$ のどちらかを観測し，アリスがどちらの基底で観測したかはまったくわからない．

では，ボブが彼の量子ビットのクローンをつくることができたらどうだろうか．彼はアリスが観測した後に，彼の手元の量子ビットの多くのクローンをつくり，それを $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の基底で観測する．もしアリスが $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ の基底で観測すれば，ボブがクローンを観測したとき，すべてのクローンが $|0\rangle$ (または $|1\rangle$) であることが観測される．一方，アリスが $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ の基底で観測すれば，ボブのクローンは $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の同じウエイトの重ね合わせであり，観測結果は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ が五分五分で得られる．このようにして，量子ビットのクローンができれば，アリスの使った基底が瞬時にしてボブに伝わってしまうのである．もちろんこれは「光速を超えて伝わる情報はない」という特殊相対性理論に反してしまう．したがって，未知の量子状態のクローンはできない．

定理 10.1 では，クローンを作成するユニタリー行列が存在しないことを証明したが，本節の議論によると，いかなる方法をもってしても未知の量子状態のクローンはできないことがわかる．

10-6　量子コンピュータ

本節では，量子コンピュータについて手短に紹介する．より詳しくは文献[1, 2, 3] などを参照されたい．

n 量子ビット系を量子レジスタとよぶことはすでに述べた．いま，2 つの量子レジスタ，レジスタ 1 とレジスタ 2 からなる系を考える．それぞれのヒルベルト空間を $\mathcal{H}_a$ $(a = 1, 2)$ とする．説明の都合上，2 つのレジスタはどちらも n 量子ビットから構成されているとする．ここで関数

$$f : \{0, 1, \ldots, 2^n - 1\} \to \{0, 1, \ldots, 2^n - 1\}$$

を考える．この f を実現するユニタリー行列を U_f とし，その量子レジスタへの作用を

$$U_f|x\rangle|\mathbf{0}\rangle \to |x\rangle|f(x)\rangle$$

で定義する．ただし $|x\rangle$ は $|b_{n-1}, b_{n-2}, \ldots, b_1, b_0\rangle$ を 10 進数 $x = b_{n-1}2^{n-1} + b_{n-2}2^{n-2} + \cdots + b_1 2^1 + b_0 2^0$ で表したものである．また $|\mathbf{0}\rangle := |00\ldots00\rangle$ である．単純に $U_f|x\rangle = |f(x)\rangle$ とできないのは，$f(x)$ が 1 対 1 の関数でないとき逆関数 f^{-1} が定義できず，それを表現するユニタリー行列が存在しないからである．

ここまでは，通常の古典的な関数と何ら変わりがない．量子系が本領を発揮するのは以下のような場合である．量子レジスタ 1 において，すべての基底ベクトルを同じ係数で重ね合わせた状態

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \in \mathcal{H}_1 \tag{10.21}$$

を考えよう．量子レジスタ 2 は $|\mathbf{0}\rangle$ にあるものとする．全系の状態は $|\Psi_0\rangle|\mathbf{0}\rangle$ である．この状態に U_f を作用させると，U_f の線形性から

$$U_f|\Psi_0\rangle|\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} U_f|x\rangle|\mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle|f(x)\rangle \tag{10.22}$$

が得られる．U_f は 2^n 個の基底ベクトルに同時に作用したことに注意されたい．$n = 100$ であれば，これは $2^{100} \simeq 10^{30}$ の計算を並列に処理したことを意味する．また，(10.22) の右辺は一般にエンタングルしており，古典的な

記述ができないことにも注意されたい.

量子コンピュータはこの重ね合わせの原理による超並列性と，古典的には存在しないエンタングル状態を使って，古典コンピュータを凌駕する計算を行う．アルゴリズムはユニタリー行列の形で実装される．アルゴリズムによっては途中で観測を要するものもある．現在，素因数分解を実行するショアーのアルゴリズム，データベース・サーチを行うグローバーのアルゴリズムなどが開発されているほか，物理系や化学系へのシミュレーションなどの応用が期待される．本書が著された時点では，10 量子ビット程度の小規模量子コンピュータは実現しているが，スーパーコンピュータを凌駕する規模の量子コンピュータの実現には，克服すべき課題が山積している．

関連図書

[1] E. Riefell and W. Polak, ACM Computing Surveys (CSUR) **32**, 300 (2000).

[2] M. A. Neilsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).

[3] M. Nakahara and T. Ohmi, *Quantum Computing: From Linear Algebra to Physical Realizations*, Taylor & Francis (2008).

[4] D. M. Greenberger, M. A. Horne and A. Zeilinger, in *Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*, ed. M. Kafatos, Kluwer (1989). arXiv:0712.0921 [quant-ph].

[5] W. Dür, G. Vidal and J. I. Cirac, Phys. Rev. A **62**, 062314 (2000).

[6] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, Phys. Rev. **41**, 777 (1935).

[7] V. Vedral, *Introduction to Quantum Information Science*, Oxford University Press (2006).

11. 量子鍵配布と量子テレポーテーション

一般に，量子コンピュータで古典コンピュータのパフォーマンスを凌駕する計算をするには，多くの量子ビットと量子ゲートを必要とする．両者のクロスオーバーは 100 から 1000 量子ビットで起こると見積もられている．

では，少数の量子ビットでは意味のある情報処理はできないのであろうか？じつは量子ビットを 1 つずつ繰り返し送ることにより，絶対安全な暗号を実現することができる．以下ではベネットとブラサールによる **BB84** とよばれる量子鍵配布 (**QKD**=Quanutm Key Distribution) の方法を紹介する [1]．マスコミなどでは，しばしば「量子暗号」という言葉が使われ，あたかも量子ビットを使った暗号が存在するかのような印象を与える．しかし，以下でみるように，実際に用いる暗号は古典的な暗号で，その暗号をつくったり，解読したりする「鍵」を量子ビットを使って配布するのである．量子鍵配布システムは国内外の企業ですでに商品化されている．盗聴者がいる場合，盗聴者が量子ビットを観測することにより量子状態が変化してその存在を明らかにすることで，QKD の安全性が保証される．

現在のインターネット通信などで使用されている RSA 公開鍵暗号は，

「2 つの素数の積で表される大きな桁数の整数の素因数分解は，古典コンピュータではとてつもなく時間がかかる」

という事実に基づいている．しかし量子コンピュータが実現すると，大きな桁数の数の素因数分解は「ショアーのアルゴリズム」を用いて実用的な時間で実行されることが期待される．量子コンピュータが実現した後の暗号は，量子鍵配布を用いることになるであろう．

11-1　量子鍵配布 (BB84 プロトコル)

11-1-1　ワン・タイム・パッド

ワン・タイム・パッドでは，暗号作成および解読に共通の鍵を使う．この鍵をもっているのが，この世の中で送信者 (アリス) と，受信者 (ボブ) のみで，かつ鍵が 1 回限りしか使われなければ暗号は見破られることがなく，絶対安全である．

例えば，アリスが 2 進数で表されるメッセージ　101101101110　をボブに送る場合を考えよう．この暗号化される前のメッセージを「平文」という．両者は前もって平文と同じビット数の鍵　110100110010　を共有している．暗号化するには，メッセージの各ビットに，鍵の対応するビットを加え，次の演算 $\oplus$ を行う：

$$0 \oplus 0 = 0, \quad 0 \oplus 1 = 1, \quad 1 \oplus 0 = 1, \quad 1 \oplus 1 = 0. \tag{11.1}$$

要は，ビットごとに mod 2 の和をとるのである．上記の例では，暗号化されたメッセージ (暗号文) は

$$\begin{array}{rr} & 101101101110 \\ +) & 110100110010 \\ \hline & 011001011100 \end{array}$$

となる．ビットごとの足し算なので，桁上がりはないことに注意されたい．暗号文　011001011100　を盗聴者が見ても，鍵がないので決して平文を復元することはできない．鍵が n ビットの列であるとき，2^n 通りの鍵をすべて試しても，意味のあるメッセージはたくさん現れ，どれがアリスの送った平文かはわからない．

さて，暗号文を受け取ったボブは同じ鍵をビットごとに加えて復号を行う．

$$\begin{array}{rr} & 101101101110 \\ +) & 110100110010 \\ \hline & 011001011100 \\ +) & 110100110010 \\ \hline & 101101101110 \end{array}$$

同じ鍵をビットごとに 2 回足すと元のメッセージが復号されることは，$0 \oplus 0 = 0, 1 \oplus 1 = 0$ から明らかであろう．鍵の各ビットを 2 回足すと，何もしない

ことに等しいのである．

ただし，同じ鍵を何度も使うと，いくつかある鍵の候補が狭まってきて，やがてすべての暗号文に対して意味をもつ平文を復号する鍵が 1 つ決まる．このときは盗聴者は盗聴に成功するのである．したがって，絶対安全を保証するには鍵は 1 回きりしか用いてはならない．

11-1-2　量子鍵配布

鍵をアリスとボブが共有するために，その鍵を電話やインターネットなどの古典的なチャネルを通して送ると，盗聴者に鍵を読まれる可能性がある．しかし量子ビットを用いると，安全に鍵を共有することができる．この方法を発案者にちなんで BB84 とよぶ [1].

鍵を共有するために，アリスがボブに $4N$ 個の量子ビットを 1 個ずつ送ることを考えよう．後で明らかになるように，N ビットからなる暗号鍵を生成するには $4N$ 個の量子ビットを送る必要がある．

アリスとボブがワン・タイム・パッドに使う鍵を生成する方法を具体的に与えよう．彼らは双方向の古典通信路と，アリスからボブへの一方通行の量子ビットの送信路 (以下，量子通信路という) をもっている．これを図 11.1 のように表す．古典通信路も量子通信路も第三者 (以下，イブとよぶ[1]) によって，その通信内容を盗み見られる可能性がある．アリスはボブに，量子通信路を通して量子ビットを 1 つずつ送り，ボブは彼が受信した量子ビットの状態を測定することができる．

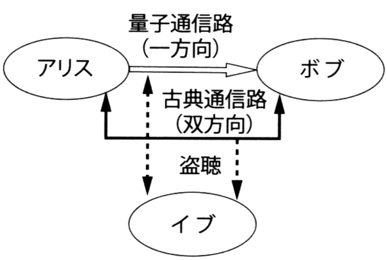


図 11.1　量子鍵配布プロトコル BB84

1)　英語の “盗聴者 (eavesdropper)” にちなむ．

話を具体的にするために，量子ビットとして1個の光子を使うことにする．光子の偏光でビットの0と1を表すことにするが，ここで2組の偏光状態を採用する：

$$\text{偏光状態 (a)} \qquad 0 \mapsto |\updownarrow\rangle, \quad 1 \mapsto |\leftrightarrow\rangle,$$

$$\text{偏光状態 (b)} \qquad 0 \mapsto |\swarrow\!\!\nearrow\rangle, \quad 1 \mapsto |\nwarrow\!\!\searrow\rangle.$$

これらの4つの偏光状態の光子を，それぞれ a0, a1, b0, b1 と表そう．例えば $|\mathrm{a1}\rangle$ は $|\leftrightarrow\rangle$ の状態の光子で，偏光軸 (a) におけるビット1を表す．

では，BB84のプロトコルを紹介しよう．

1) アリスは a0, a1, b0, b1 の1つをランダムに選び，その状態の光子をボブに送る．

2) ボブは (a) か (b) の偏光軸をランダムに選び，受け取った光子を観測する．

アリスの (a), (b) とボブの (a), (b) が一致すれば，ボブはアリスの0または1を確率1で観測する．例えば，アリスが $|\mathrm{b0}\rangle$ を送ってボブが偏光軸 (b) を採用すれば，ボブが $|\mathrm{b0}\rangle$ を観測する確率は1となる．

一方，アリスの (a), (b) とボブの (a), (b) が一致しない場合は，アリスが0を送ってもボブが0を観測する確率は1/2，1を観測する確率も1/2となる．例えば，アリスが $|\mathrm{b0}\rangle$ を送って，ボブが (a) の偏光軸を採用した場合，$|\mathrm{b0}\rangle$ は $|\updownarrow\rangle$ と $|\leftrightarrow\rangle$ の同じウエイトの重ね合わせであるので，ボブの結果が a0 となる確率と a1 となる確率はともに1/2となる．(他の場合も同様であることは，各自確かめられたい．)

3) アリスは全部で $4N$ 個の光子を送る．アリスは平均して，偏光 (a) を $2N$ 回，(b) を $2N$ 回使う．

一方．ボブも平均して，偏光 (a) を $2N$ 回，(b) を $2N$ 回使う．

4) アリスとボブは，$4N$ 個の光子を送信，受信するのに偏光軸 (a) を使ったか (b) を使ったかを古典通信路を用いてリストをやりとりするが，送ったり読み取ったりした0，1は秘密にしておく．平均して $2N$ 回はアリスとボブの (a), (b) は一致，$2N$ 回は異なるであろう．

5) アリスとボブは，(a), (b) が一致したときの0，1のみを手元に残し，(a), (b) が一致しないときのデータはすべて破棄する．後者の場合はア

リスとボブの 0, 1 が一致する確率は 1/2 で，鍵生成には使えないからである．

6) 以下にみるように，もし量子通信路に盗聴者がいなければ，アリスとボブの手元に残ったデータの 0, 1 の列は一致しているはずである．一方，後で示すように，盗聴者がいる場合は，アリスとボブの (a), (b) が一致していても，両者の 0, 1 が不一致のビットが現れる．

それを確かめるために，手元に残った $2N$ 個の 0, 1 の列から，古典通信路を使って同意した方法で (例えば $2N$ 個の中の $1, 3, 4, 8, \ldots$ 番目のビットなど) N 個選び，それらのビットを古典通信路を使って交換して比較する．比較のために使ったビットは，古典通信路を用いて交換したので，盗聴されている可能性があり，使った後は廃棄する．

7) 交換されたすべてのビットが一致していれば，量子通信路を盗聴した者はおらず，残された N 個のビットを使ってワン・タイム・パッドの暗号鍵を生成すれば，絶対に安全である．

一方，交換した N 個のビットの中に一致しないものがあれば，イブが量子通信路を盗聴していることがわかる．この場合，アリスは別の量子通信路を用いて，ボブに再度 $4N$ 個の光子を送り，盗聴者がいないことを確認できるまで，上記の手続きを繰り返す．

盗聴者がいない例を考えよう．

アリスのビット	0	1	0	0	1	1	0	1	0	0	1	0	...
アリスの偏光軸	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(a)	...
ボブの偏光軸	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	...
ボブのビット	0	1	?	?	1	?	?	?	?	0	?	0	...

? で表されるところは 0 か 1 が確率 1/2 で現れ確定しないので，これらのデータは破棄する．アリスとボブは，互いの偏光軸 (a), (b) が一致した場合のビット列 $0, 1, 1, 0, 0, \ldots$ を保存する．アリスとボブは，これらの 0, 1 列の半分を双方向古典通信路を用いて交換し，盗聴者イブの存在の有無を確かめる．N が十分大きいときは，交換したビットがすべて一致していると，盗聴者が存在する確率は指数関数的に小さくなることを後に示す．このときは，残った N 個のビットをワン・タイム・パッドの暗号鍵として用いる．このビット列はアリスとボブしか知らないので，まず安全である．

次に，盗聴者イブが存在する場合を考えよう．イブは量子通信路を盗聴し，やはり (a) か (b) をランダムに選んでアリスが送る光子を観測する．その後，その存在を隠すために，観測した状態の光子を量子通信路にもどす[2)]．アリスとイブの偏光軸は確率 1/2 で異なる．例えば，アリスが b0 の光子を送りイブがそれを (a) で観測すると，イブが a0 を得る確率が 1/2，a1 を得る確率が 1/2 となる．イブは自分が観測した a0 または a1 をボブに送る．ボブがアリスと同じく (b) の偏光軸で光子を観測するとしよう．イブが a0 を送るとボブは確率 1/2 で b0 を，確率 1/2 で b1 を観測する．イブが a1 を送っても同様にボブは確率 1/2 で b0 を，確率 1/2 で b1 を観測する．したがって，ボブがアリスの送った b0 と同じ光子を得る確率は 1/2 である．イブが偏光軸 (b) を選ぶ確率は 1/2 であり，このときはイブとボブはアリスが送った b0 を正しく観測する．したがって，ボブが b0 を観測する確率は $1/2+1/2\times1/2=3/4$，ボブが b1 を観測する確率は 1/4 となる．他の場合も同様で，結局アリスとボブが同じ偏光軸 (a), (b) を採用しても，1/4 の確率でビットが一致しない．したがって，盗聴者の有無を確かめるために $2N$ 個のビットのうち N 個のビットを交換すると，そのうちほぼ $N/4$ 個は，アリスとボブの偏光が一致しているにもかかわらず，ビットが異なる．イブが悪運に恵まれ，盗聴しているにもかかわらず，N 個のすべての量子ビットでアリスとボブのビットが一致する確率は $(3/4)^N$ で，N が大きくなるにつれて無視できるくらい小さくなる．例えば $N=1000$ に対しては $(3/4)^{1000}\simeq10^{-125}$ となる．以下の例をみよう．

アリスのビット	0	1	0	0	1	1	0	1	0	0	1	0	...
アリスの偏光軸	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(a)	...
イブの偏光軸	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	...
イブのビット	0	1	0	0	?	?	?	?	?	0	1	?	...
ボブの偏光軸	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(b)	(a)	...
ボブのビット	0	1	?	?	$\underline{?}$	?	?	?	?	0	?	$\underline{?}$	...

？に下線があるビットは，アリスとボブが同じ偏光軸を採用しているにもかかわらず，イブが彼らと異なる偏光軸を用いたために，アリスとボブのビットが一致しない可能性のあるビットである．

---

2)　実際は以下でみるように，その存在を隠すことはできないのでこれは悪あがきであるが，何も送らないのよりはましであろう．

BB84 以外にも，量子鍵配布には E91 プロトコル [2]，B92 プロトコル [3] などがあげられる．興味のある読者はこれらの論文も一読されたい．

11-2 量子テレポーテーション

量子テレポーテーションは，離れた場所にいるアリスとボブの間で，未知の量子状態を送る方法である．人や物を瞬時に遠隔地に送るものではない．量子状態を送る過程で古典通信路による情報の送受信を含んでいるので，光速を超えることはできない．量子テレポーテーションは，すでに多くの物理系で実験的に確認されている．

アリスは未知の状態

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

をもっており，これを測定することなくボブに伝えたい．この未知の量子ビットを量子ビット 1 とよぶ．アリスとボブは，前もってベル状態

$$|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

を配布されているものとする．アリスは最初の量子ビット (これを量子ビット 2 という) をもっており，ボブは後の量子ビット (これを量子ビット 3 という) をもっている．図 11.2 はこれらのセッティングを表したものである．

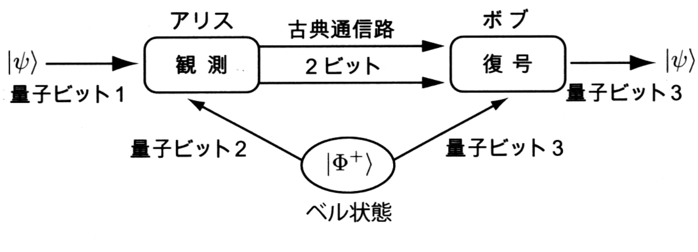


図 11.2 量子テレポーテーションのセッティング．アリスは量子ビット 1, 2 を保有し，ボブは量子ビット 3 を保有する．アリスは手元の 2 量子ビットを測定し，その結果を 2 ビットの古典ビットにしてボブに送る．ボブはアリスが送った 2 ビットに依存するユニタリー変換を量子ビット 3 に作用させ $|\psi\rangle$ を復号する．

では，量子テレポーテーションのしくみを紹介しよう．アリスとボブの最初の状態は $|\psi\rangle|\Phi_+\rangle$ であるが，それを以下の線形結合に分解する：

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} |\Phi_+\rangle = |\Phi_+\rangle \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} + |\Psi_+\rangle \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} + |\Phi_-\rangle \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix} + |\Psi_-\rangle \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}. \tag{11.2}$$

ただし

$$|\Phi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \qquad |\Psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle)$$

である．

問 11.1　式 (11.2) を確かめよ．

次に，アリスは自分の手元にある 2 つの量子ビットを観測する．どのようにしてエンタングル状態にある 2 つの量子ビットを観測するかは，量子ゲートの知識が必要となり，本書の範囲を超えるのでここでは扱わない．(ただし問 11.2 を参照．詳しくは [4, 5] などを参照されたい．) アリスの観測により，アリスの状態は $|\Phi_\pm\rangle$, $|\Psi_\pm\rangle$ の 4 つの可能性のうち 1 つに決まる．それと同時にボブの状態も瞬時に 4 つの可能性のうちの 1 つに決まってしまう．アリスは自分の観測結果から，ボブがもっている量子ビット 3 がアリスの手元にあった量子ビット 1 からどれだけずれているかが，$|\psi\rangle$ そのものを知らなくてもわかる．アリスの観測結果は 4 通りあり，古典的な 2 ビットでそれを表すことができる．その 2 ビットを通常の電話，電子メールなどでボブに知らせれば，ボブは自分の手元の量子ビット 3 に必要な修正を加えて，アリスの手元にあった $|\psi\rangle$ を再現できる．これを量子テレポーテーションという．

例として，アリスが手元の 2 量子ビットを観測して $|\Phi_+\rangle$ を得たとしよう．このときボブの量子ビット 3 は $(a,b)^t = |\psi\rangle$ にあり，アリスの観測結果を受けたボブは何もしなくても量子ビット 3 が $|\psi\rangle$ になっていることがわかる．一方，アリスが $|\Psi_-\rangle$ を観測したとしよう．するとボブの状態は $(b,-a)^t$ であることが確定する．アリスの観測結果の報告を受けたボブは，量子ビット 3 を $|\psi\rangle$ にするためには

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

より，量子ビット 3 に $-i\sigma_y$ を作用させればよいことがわかる．

他の場合も同様に調べると，アリスの観測結果，対応するボブの状態，ボブが $|\psi\rangle$ を再現するのに必要は補正は

アリスの観測結果	ボブの量子ビット 3	必要な補正
$\|\Phi_+\rangle$	$(a,b)^t$	何もしない
$\|\Psi_+\rangle$	$(b,a)^t$	σ_x
$\|\Phi_-\rangle$	$(a,-b)^t$	σ_z
$\|\Psi_-\rangle$	$(b,-a)^t$	$-i\sigma_y$

(11.3)

とまとめられる．量子力学では全体にかかる位相は無視できるので，最後の補正は σ_y と書いてもかまわない．

問 11.2 次の行列を定義する：

$$U_{\rm H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad U_{\rm CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

ユニタリー行列 $U = (U_{\rm H} \otimes I_2) \cdot U_{\rm CNOT}$ を求めよ．次に，U を $|\Psi_\pm\rangle, |\Phi_\pm\rangle$ に作用させて得られるベクトルを求めよ．$|\Psi_\pm\rangle, |\Phi_\pm\rangle$ はエンタングル状態であるが，U を作用させた後はテンソル積状態になっていることを確かめよ．

アリスがもっていた量子ビット 1 の状態 $|\psi\rangle$ がボブの量子ビット 3 に再現されたので，これはノー・クローニング定理を破っているようにみえるかもしれない．しかし，アリスの量子ビット 1 は観測により $|\psi\rangle$ とは似ても似つかない状態 ($|\Psi_\pm\rangle, |\Phi_\pm\rangle$ の片割れ) に変わっているので，量子テレポーテーションはノー・クローニング定理に反しない．

関 連 図 書

[1] C. H. Bennett and G. Brassard, in Proc. IEEE Int. Conf. Comp., Systems and Signal Processing **175** (1984).

[2] A. Ekert, Phys. Rev. Lett. **67**, 661 (1991).

[3] C. H. Bennett, Phys. Rev. Lett. **68**, 3121 (1992).

[4] M. A. Neilsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).

[5] M. Nakahara and T. Ohmi, *Quantum Computing: From Linear Algebra to Physical Realizations*, Taylor & Francis (2008).

略　　解

第 1 章

問 1.1　$|v_1\rangle, |v_2\rangle \in V_1 \cap V_2$, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ をとる．V_1, V_2 は部分空間なので，$c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle \in V_1$ かつ $c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle \in V_2$ となり，$c_1|v_1\rangle + c_2|v_2\rangle \in V_1 \cap V_2$ が成り立つ．

問 1.2　(1)　線形独立．(2)　線形従属．

問 1.3　$|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ が線形独立であるための必要十分条件は $c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle = \mathbf{0}$ の行列表示の係数行列の行列式が 0 とならないことである．よって，$x \neq y$ が得られる．

問 1.4　(1)　3 つのベクトルを列ベクトルにもつ行列の行列式は $2 \neq 0$ となるので，線形独立である．また，任意のベクトル $|x\rangle = (x_1, x_2, x_3)^t \in \mathbb{C}^3$ は $|x\rangle = \dfrac{x_1 - x_2 + x_3}{2}(1,0,1)^t + \dfrac{x_1 - x_2 - x_3}{2}(0,-1,-1)^t + \dfrac{x_1 + x_2 - x_3}{2}(1,1,0)^t$ と表される．したがって，これらは基底となる．

(2)　x_2 を消去すると，$|x\rangle = x_1(1,-2,0)^t + x_3(0,-3i,1)^t$ と表される．$(1,-2,0)^t$ と $(0,-3i,1)^t$ は線形独立なので，これらが基底となる．

問 1.7　$\||x\rangle\| = 2$, $\langle x|y\rangle = 1 - 2i$, $\langle y|x\rangle = \langle x|y\rangle^* = 1 + 2i$,

$$|x\rangle\langle y| = \begin{pmatrix} -i & 1+i & 1-i \\ 1-i & 2i & 2 \\ 1 & -1+i & 1+i \end{pmatrix}.$$

第 2 章

問 2.1　$A^\dagger = \begin{pmatrix} -i & 3 & 1+i \\ 0 & 1-i & 4 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$

問 2.3　$(I + iH)(I - iH) = (I - iH)(I + iH)$ より，$U^\dagger U = I$ が得られる．

問 2.4　$\mathrm{tr}\,(AB) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} A_{jk}B_{kj} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} B_{kj}A_{jk} = \mathrm{tr}\,(BA)$

問 2.5　適当に区分けされた行列 $X \otimes Y$ の i 行 j 列目のブロックを $(X \otimes Y)_{ij}$ とすると，

$$\{(A \otimes B)(C \otimes D)\}_{ij} = \sum_{k=1}^{nq} (A \otimes B)_{ik}(C \otimes D)_{kj}$$

$$= \sum_{k=1}^{nq} a_{ik} c_{kj} BD = (AC)_{ij} BD = \{(AC) \otimes (BD)\}_{ij}.$$

問 **2.6**　(1) 問 2.5 の解で述べた記法のもとで

$$\{A \otimes (B+C)\}_{ij} = a_{ij}(B+C) = a_{ij}B + a_{ij}C = (A \otimes B)_{ij} + (A \otimes C)_{ij},$$
$$\{(A \otimes B)^\dagger\}_{ij} = a_{ji}^* B^\dagger = (A^\dagger \otimes B^\dagger)_{ij}.$$

また，$(A \otimes B)(A^{-1} \otimes B^{-1}) = (AA^{-1}) \otimes (BB^{-1}) = I_m \otimes I_n = I_{mn}$ より，$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$ が成り立つ.

(2) A, B がエルミート行列ならば，$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger = A \otimes B$ より，$A \otimes B$ はエルミート行列である.

(3) A, B がユニタリー行列ならば，$(A \otimes B)(A \otimes B)^\dagger = (A \otimes B)(A^\dagger \otimes B^\dagger) = (AA^\dagger) \otimes (BB^\dagger) = I \otimes I$ より，$A \otimes B$ はユニタリー行列である.

問 **2.7**　$\sigma = (1,3)(6,4)(2,6)$ と 3 つの互換の積で表されるので，$\mathrm{sgn}(\sigma) = -1$. 一方，$\sigma$ において転倒している対は $1-3$, $1-4$, $2-3$, $2-4$, $2-5$, $2-6$, $5-6$ の 7 組であるから $E(\sigma) = 7$ となる.

問 **2.8**　$\lim_{q \to 1} [n]_q = \lim_{q \to 1}(1 + q + \cdots + q^{n-1}) = \lim_{q \to 1}(1 + 1 + \cdots + 1^{n-1}) = n$

第 3 章

問 **3.1**　(3) $(e^A)^\dagger = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(A^k)^\dagger}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(A^\dagger)^k}{k!} = e^{A^\dagger}$

(4) $(B^{-1}AB)^k = B^{-1}ABB^{-1}AB \cdots B^{-1}AB = B^{-1}A^kB$ より，

$$e^{B^{-1}AB} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(B^{-1}AB)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B^{-1}A^kB}{k!} = B^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} B = B^{-1}e^AB.$$

第 4 章

問 **4.1**　(1) $\det(|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle) = 4 \neq 0$ より，これらのベクトルは線形独立.

(2) $|e_1\rangle = (-1,1,1)^t/\sqrt{3}$, $|e_2\rangle = (1,-1,2)^t/\sqrt{6}$, $|e_3\rangle = (1,1,0)^t/\sqrt{2}$.

(3) $c_i = \langle e_i | u \rangle$ より，$c_1 = 1/\sqrt{3}$, $c_2 = \sqrt{2/3}$, $c_3 = \sqrt{2}$.

問 **4.2**　$|e_1\rangle = (1,1,1)^t/\sqrt{3}$, $|e_2\rangle = (1,1,-2)^t/\sqrt{6}$.

第 5 章

問 **5.1**　$A_D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

問 5.2　F がエルミート演算子であるとき，$(A_{F^\dagger})_{ij} = \langle e_i|F^\dagger|e_j\rangle = (\langle e_j|F|e_i\rangle)^* = (A_F)^*_{ji}$ となり，これはエルミート行列に対応している．

F がユニタリー演算子であるとき，$F^\dagger F$ は恒等演算子なので，演算子の合成と行列の積の関係から $(A_{F^\dagger})(A_F) = I_n$ となり，これはユニタリー行列に対応している．

問 5.3　行の基本操作より，$\mathrm{Ker}\,A$ の基底は $(1,0,-1)^t$ であり，列の基本操作より，$\mathrm{Im}\,A$ の基底は $(0,1,0)^t$, $(1,0,1)^t$ である．よって，$\dim\mathrm{Ker}\,A = 1$, $\dim\mathrm{Im}\,A = 2$ である．また，$\mathrm{Ker}\,A$ の正規直交基底は $(1,0,-1)^t/\sqrt{2}$ であり，$\mathrm{Im}\,A$ の正規直交基底は $(0,1,0)^t$, $(1,0,1)^t/\sqrt{2}$ である．

第 6 章

問 6.1　(1)　A が正則のときは，$AB = A(BA)A^{-1}$ となり，

$$\det(\lambda I_n - AB) = \det[A(\lambda I_n - BA)A^{-1}] = \det(\lambda I_n - BA)$$

から，AB と BA は同じ特性方程式を満たす．したがって $\mathrm{Spec}(AB) = \mathrm{Spec}(BA)$．$A^{-1}$ が存在しないときは，$A' := A + \epsilon I_n$ を考えると，十分小さな ϵ に対し，A'^{-1} が存在し，$\mathrm{Spec}(A'B) = \mathrm{Spec}(BA')$ が成り立つ．$\det[\lambda I_n - (A+\epsilon I_n)B] = \det[\lambda I_n - B(A+\epsilon I_n)]$ の両辺は ϵ の多項式であり，$\epsilon \to 0$ の極限をとることができる．したがって，A^{-1} が存在しないときでも $\mathrm{Spec}(AB) = \mathrm{Spec}(BA)$ が成り立つ．[1)]

(2)　$\lambda \in \mathrm{Spec}(A)$ に対して，$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ と $A = PBP^{-1}$ より，$PBP^{-1}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ となる．P^{-1} をかけると，$BP^{-1}|\lambda\rangle = \lambda P^{-1}|\lambda\rangle$ となる．よって，$\lambda \in \mathrm{Spec}(B)$ であり，$P^{-1}|\lambda\rangle$ がその固有ベクトルである．

問 6.2　$(A\otimes I_n + I_m\otimes B)(|\lambda\rangle\otimes|\mu\rangle) = A|\lambda\rangle\otimes|\mu\rangle + |\lambda\rangle\otimes B|\mu\rangle = (\lambda+\mu)(|\lambda\rangle\otimes|\mu\rangle)$ となるので，$\lambda + \mu \in \mathrm{Spec}(A\otimes I_n + I_m\otimes B)$ となり，$|\lambda\rangle\otimes|\mu\rangle$ がその固有ベクトルである．

問 6.3　$0 = D_A(\lambda) = \det(A - \lambda I_n) = \det(A^\dagger - \lambda^* I_n) = D_{A^\dagger}(\lambda^*)$

問 6.4　A の固有値は $\lambda_1 = i$, $\lambda_2 = 1 - i$, $\lambda_3 = 1 + i$ であり，固有空間はそれぞれ $|\lambda_1\rangle = (0,1,0)^t$, $|\lambda_2\rangle = (i,0,1)^t/\sqrt{2}$, $|\lambda_3\rangle = (-i,0,1)^t/\sqrt{2}$ で張られる 1 次元部分空間である．

問 6.5　A の固有値は $\lambda_1 = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$, $\lambda_2 = i$, $\lambda_3 = \frac{1}{2}(1-\sqrt{5})$ であり，縮退していないので，A は対角化可能である．対応する固有ベクトルは $|\lambda_1\rangle = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}, 0, 1\right)^t$, $|\lambda_2\rangle = (-i, 2+i, -1)^t$, $|\lambda_3\rangle = \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}, 0, 1\right)^t$ にとることができる．よって，

---

1)　この証明は W.-H. Steeb, *Problems and Solutions in Introductory and Advanced Matrix Calculus*, World Scientific (2006) による．

$P = \begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & -i & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \\ 0 & 2+i & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ とおくと,

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\sqrt{5}) & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}(1-\sqrt{5}) \end{pmatrix}$$

と対角化される.

B の固有値は 2 (重複度 3) であり，その固有空間は $V_2 = \mathrm{Ker}(B-2I) = \mathrm{Span}(\{(1,0,-1)^t,\ (1,-3,0)^t\})$ であるので，対角化不可能である.

C の固有値は $\lambda_1 = \lambda_2 = 2,\ \lambda_3 = 5$ であり，2 に属する固有空間は $V_2 = \mathrm{Ker}(C-2I) = \mathrm{Span}(\{(1,0,-1)^t, (0,-1,1)^t\})$ であるので, 対角化可能である．対応する固有ベクトルは $|\lambda_1\rangle = (1,0,-1)^t$, $|\lambda_2\rangle = (0,-1,1)^t$, $|\lambda_3\rangle = (1,1,1)^t$ にとることができる．よって, $Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ とおくと, C は $Q^{-1}CQ = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$ と対角化される.

問 6.6　$A^k = \begin{pmatrix} \frac{4+6^k}{5} & 0 & \frac{-2+2\cdot 6^k}{5} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{-2+2\cdot 6^k}{5} & 0 & \frac{1+4\cdot 6^k}{5} \end{pmatrix}$,

$$e^{tA} = \begin{pmatrix} \frac{4e^t+e^{6t}}{5} & 0 & \frac{-2e^t+2e^{6t}}{5} \\ 0 & e^t & 0 \\ \frac{-2e^t+2e^{6t}}{5} & 0 & \frac{e^t+4e^{6t}}{5} \end{pmatrix}$$

問 6.7　漸化式は $|V_{n+1}\rangle = A|V_n\rangle$,　$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \end{pmatrix}$．$A$ の固有値は $\lambda_1 = -2,\ \lambda_2 = -1,\ \lambda_3 = 1$ で，対応する固有ベクトルは $|\lambda_1\rangle = (1,-2,4)^t$, $|\lambda_2\rangle = (1,-1,1)^t$, $|\lambda_3\rangle = (1,1,1)^t$ にとることができる．$|V_0\rangle$ は $|V_0\rangle = -|\lambda_1\rangle + 2|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle$ と展開されるので

$$x_{10} = (A^{10}|V_0\rangle)_1 = \left[-(-2)^{10}|\lambda_1\rangle + 2(-1)^{10}|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle\right]_1 = 1021.$$

問 6.8　$|V(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1e^{-2t} + c_2e^{-t} + c_3e^t \\ -2c_1e^{-2t} - c_2e^{-t} + c_3e^t \\ 4c_1e^{-2t} + c_2e^{-t} + c_3e^t \end{pmatrix}$,

$|V(t)\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-2t} + 2e^{-t} + e^t \\ 2e^{-2t} - 2e^{-t} + e^t \\ -4e^{-2t} + 2e^{-t} + e^t \end{pmatrix}$.

問 **6.9**　$|V(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1e^{-t} + c_2 + c_3e^{2t} \\ -c_1e^{-t} + 2c_3e^{2t} \\ c_1e^{-t} - c_2 + c_3e^{2t} \end{pmatrix}, \qquad |V(t)\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-t} + 1 + e^{2t} \\ e^{-t} + 2e^{2t} \\ -e^{-t} - 1 + e^{2t} \end{pmatrix}.$

問 **6.10**　$\operatorname{tr} A \cdot \operatorname{tr} B = \sum_{j=1}^{m} \lambda_j \sum_{k=1}^{n} \mu_k = \sum_{\substack{1 \le j \le m \\ 1 \le k \le n}} \lambda_j \mu_k = \operatorname{tr}(A \otimes B),$

$$\det(A \otimes B) = \prod_{\substack{1 \le j \le m \\ 1 \le k \le n}} \lambda_j \mu_k = \prod_{\substack{1 \le j \le m \\ 1 \le k \le n}} \lambda_j \prod_{\substack{1 \le j \le m \\ 1 \le k \le n}} \mu_k$$

$$= \left(\prod_{1 \le j \le m} \lambda_j \right)^n \left(\prod_{1 \le k \le m} \mu_k \right)^m = (\det A)^n (\det B)^m.$$

第 7 章

問 **7.1**　(2)　$A^\dagger A = -A^2 = AA^\dagger$ より，正規行列である．A の固有値を λ，対応する固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ とすると，$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$, $\lambda^*\langle\lambda| = \langle\lambda|A^\dagger = -\langle\lambda|A$ より，

$$\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda|\lambda\rangle = \langle\lambda|A|\lambda\rangle = \langle\lambda|(-\lambda^*)|\lambda\rangle = -\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$$

となる．$\langle\lambda|\lambda\rangle \neq 0$ より，λ は 0 または純虚数である．

(3)　$A^\dagger A = I_n = AA^\dagger$ より，正規行列である．A の固有値を λ，対応する固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ とすると，$A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$, $\lambda^*\langle\lambda| = \langle\lambda|A^\dagger = \langle\lambda|A^{-1}$ より，

$$|\lambda|^2\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda^*\langle\lambda|\lambda|\lambda\rangle = \langle\lambda|A^{-1}A|\lambda\rangle = \langle\lambda|\lambda\rangle$$

となる．$\langle\lambda|\lambda\rangle \neq 0$ より，$|\lambda| = 1$ である．

問 **7.2**　A, B はエルミート行列で，C はユニタリー行列なので，正規行列である．直接確かめてもよい．

A:　$U_A = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\pi/4} & -e^{i\pi/4} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ に対して，$U_A^\dagger A U_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$,

B:　$U_B = \dfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 2i & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{5} & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$ に対して，$U_B^\dagger B U_B = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$,

C:　$U_C = \dfrac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -i & e^{i5\pi/6} & e^{i\pi/6} \\ 1 & e^{i2\pi/3} & e^{-i\pi/3} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$ に対して，

$$U_C^\dagger C U_C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/3} \end{pmatrix}.$$

問 **7.3**　$-i|{-i}\rangle\langle{-i}| + 2|2\rangle\langle 2| = \dfrac{1}{2} \begin{pmatrix} 2-i & 1-2i \\ -1+2i & 2-i \end{pmatrix}$

問 7.4 (1) A の固有値は ±1，対応する規格化された固有ベクトルは $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}(1, \sqrt{2}-1)^t$, $|-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}(-1, \sqrt{2}+1)^t$ である．

B の固有値は $10, 1$，対応する規格化された固有ベクトルは $|10\rangle = (-2,1,2)^t/3$, $|1;1\rangle = (1,0,1)^t/\sqrt{2}$, $|1;2\rangle = (1,2,0)^t/\sqrt{5}$ である．

(2) $A = 1 \cdot \begin{pmatrix} \frac{2+\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{2-\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} + (-1) \begin{pmatrix} \frac{2-\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{2+\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix}$,

$$B = 10 \cdot \begin{pmatrix} \frac{4}{9} & -\frac{2}{9} & -\frac{4}{9} \\ -\frac{2}{9} & \frac{1}{9} & \frac{2}{9} \\ -\frac{4}{9} & \frac{2}{9} & \frac{4}{9} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{5}{9} & \frac{2}{9} & \frac{4}{9} \\ \frac{2}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{2}{9} \\ \frac{4}{9} & -\frac{2}{9} & \frac{5}{9} \end{pmatrix}$$

(3) $\exp(itA) = \begin{pmatrix} \cos t + \frac{i\sin t}{\sqrt{2}} & \frac{i\sin t}{\sqrt{2}} \\ \frac{i\sin t}{\sqrt{2}} & \cos t - \frac{i\sin t}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$,

$$\exp(itB) = \begin{pmatrix} \frac{1}{9}e^{it}\left(5+4e^{9it}\right) & -\frac{2}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) & -\frac{4}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) \\ -\frac{2}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) & \frac{1}{9}e^{it}\left(8+e^{9it}\right) & \frac{2}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) \\ -\frac{4}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) & \frac{2}{9}e^{it}\left(-1+e^{9it}\right) & \frac{1}{9}e^{it}\left(5+4e^{9it}\right) \end{pmatrix}$$

(4) $A^{-1} = 1 \cdot \begin{pmatrix} \frac{2+\sqrt{2}}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{2-\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} + (-1) \begin{pmatrix} \frac{2-\sqrt{2}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \\ -\frac{\sqrt{2}}{4} & \frac{2+\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} = A$,

$$B^{-1} = \frac{1}{10} \cdot \begin{pmatrix} \frac{4}{9} & -\frac{2}{9} & -\frac{4}{9} \\ -\frac{2}{9} & \frac{1}{9} & \frac{2}{9} \\ -\frac{4}{9} & \frac{2}{9} & \frac{4}{9} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{5}{9} & \frac{2}{9} & \frac{4}{9} \\ \frac{2}{9} & \frac{8}{9} & -\frac{2}{9} \\ \frac{4}{9} & -\frac{2}{9} & \frac{5}{9} \end{pmatrix} = \frac{1}{10} \begin{pmatrix} 6 & 2 & 4 \\ 2 & 9 & -2 \\ 4 & -2 & 6 \end{pmatrix}$$

問 7.8 (1) $\langle\psi|A|\psi\rangle = 1 + e^{i\beta}\cos\theta\sin\theta = 1 + \frac{1}{2}e^{i\beta}\sin 2\theta$ より，数域は $|z-1| = |\frac{1}{2}e^{i\beta}\sin 2\theta| \le \frac{1}{2}$ となる．

(2) $\mathrm{Spec}(A) = \{1\}$ より，$\rho(A) = 1$ であり，(1) より A の数域半径は $3/2$ である．

第 8 章

問 8.2 A: $U_A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_A = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$, $V_A = \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$

に対して，$A = U_A \Sigma_A V_A^\dagger$ となる．

$$B\colon U_B = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \Sigma_B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V_B = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

に対して，$B = U_B \Sigma_B V_B^\dagger$ となる．

問 8.3　$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ に対して，$A = U\Sigma V^\dagger$ となる．よって，$\mathrm{rank}\, A = \mathrm{rank}\, \Sigma = 2$ である．

問 8.4　A: $\Sigma'_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ に対して，$\bar{A} = V_A \Sigma_A U_A^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 \\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$,

B: $\Sigma'_B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ に対して，$\bar{B} = V_B \Sigma'_B U_B^\dagger = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$.

問 8.5

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

に対して，$A = U\Sigma V^\dagger$ となる．

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\pi/2} \end{pmatrix}$$

と分解すると，A は

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -e^{i\pi/3} & e^{i\pi/3} & 1 \\ 1 & e^{i\pi/3} & -e^{i\pi/3} & 1 \\ -i & 1 & 1 & i \\ i & 1 & 1 & -i \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -e^{-i\pi/3} & e^{-i\pi/3} & 1 \\ 1 & e^{-i\pi/3} & -e^{-i\pi/3} & 1 \\ i & 1 & 1 & -i \\ -i & 1 & 1 & i \end{pmatrix}$$

と分解される．

第 9 章

問 9.2　(1)　$U = e^{-iHt/\hbar} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t/2) & e^{i\pi/4} \sin(\omega t/2) \\ -e^{-i\pi/4} \sin(\omega t/2) & \cos(\omega t/2) \end{pmatrix}$ より，

$$|\psi(t)\rangle = U|\psi(0)\rangle = \Big(\cos(\omega t/2), -e^{-i\pi/4} \sin(\omega t/2)\Big)^t.$$

(2)　$P_\uparrow(t) = \langle \psi(t)| \uparrow \rangle \langle \uparrow |\psi(t) = \cos^2(\omega t/2)$,
$\langle \sigma_z \rangle = \langle \psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = \cos(\omega t)$.

(3) σ_x の固有値 1 の固有ベクトルは $|+\rangle := (1,1)^t/\sqrt{2}$. よって

$$P_+(t) := \langle\psi(t)|+\rangle\langle+|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4}\left[2-\sqrt{2}\sin(\omega t)\right], \quad \langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = -\frac{\sin(\omega t)}{\sqrt{2}}.$$

問 9.3 (1) $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[1+|\widehat{\boldsymbol{n}}|^2+(1-|\widehat{\boldsymbol{n}}|^2)\cos(\omega t)\right] = 1$

(2)

$$\langle\psi(t)|\sigma_x|\psi(t)\rangle = n_x^2 + \frac{1}{2}(2-n_x^2)\cos(\omega t),$$
$$\langle\psi(t)|\sigma_y|\psi(t)\rangle = n_x n_y(1-\cos(\omega t)) - n_z\sin(\omega t),$$
$$\langle\psi(t)|\sigma_z|\psi(t)\rangle = n_x n_z(1-\cos(\omega t)) + n_y\sin(\omega t).$$

問 9.4 係数の行列は $C = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$. その特異値は 2/3, 2/3, 1/3. よって $|\psi\rangle$ はエンタングルしており，そのシュミット・ランクは 3.

問 9.5 A の固有値，固有ベクトルをそれぞれ λ, $|\lambda\rangle$ とすると $A|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ であるから $\langle\lambda|A|\lambda = \lambda \geq 0$ が成り立つ．任意のベクトル $|\psi\rangle$ を A の固有ベクトルの完全系 $\{|\lambda_k\rangle\}_{1\leq k\leq d}$ で展開すると $|\psi\rangle \sum_{k=1}^{d} c_k|\lambda_k\rangle$. これから

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{d} \lambda_k|c_k|^2$$

となるが，すべての λ_k は非負であるので上記の式は非負.

問 9.6 $\rho(t) := t\rho_1 + (1-t)\rho_2$ とおくと，$\operatorname{tr}\rho(t) = 1$, $\rho(t)^\dagger = \rho(t)$ は明らか．任意の状態を $|\psi\rangle$ とする.

$$\langle\psi|\rho(t)|\psi\rangle = t\langle\psi|\rho_1|\psi\rangle + (1-t)\langle\psi|\rho_2|\psi\rangle$$

で，右辺の各項は非負であるから，左辺も非負である.

問 9.8 ρ の部分転置は $\rho^{\mathrm{pt}} = \begin{pmatrix} \frac{1-p}{4} & 0 & 0 & -\frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1+p}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1+p}{4} & 0 \\ -\frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1-p}{4} \end{pmatrix}$ となる．ρ^{pt} の特性方程式は

$$D(\lambda) = \det(\rho^{\mathrm{pt}} - \lambda I) = \left(\lambda - \frac{p+1}{4}\right)^3\left(\lambda - \frac{1-3p}{4}\right) = 0.$$

これは 3 重解 $\lambda = (1+p)/4$ と縮退していない解 $\lambda = (1-3p)/4$ をもつ．したがっ

て，$1/3 < p \le 1$ のとき ρ は正のネガティビティをもつ．

問 9.9　$\rho_2^{\mathrm{pt}} = \begin{pmatrix} \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1-p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{2} & \frac{p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p}{2} & \frac{1-p}{2} & 0 \\ \frac{1-p}{2} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \end{pmatrix}$ より，固有値は $1/2,\ 1/2,\ (1-2p)/2,$ $(-1+2p)/2$．したがって，すべての固有値が非負となるのは $p = 1/2$ のときのみ．

問 9.10　$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$．部分跡の結果はどちらの場合も $\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$．

問 9.12　$|e_1\rangle = (1,0)^t,\ |e_2\rangle = (0,1)^t$ とすると，$\rho = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$．ただし $\lambda_1 = 1/4,\ \lambda_2 = 3/4,\ |\lambda_1\rangle = |e_1\rangle,\ |\lambda_2\rangle = |e_2\rangle$．(9.54) で $|\mu_i\rangle = |\lambda_i\rangle$ とおくと，純粋化された状態は

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(1,0,0,\sqrt{3})^t.$$

問 9.15　$\sqrt{\rho_1} = \mathrm{diag}(1/\sqrt{2},0,0,1/\sqrt{2})$ より $\sqrt{\rho_1}\rho_2\sqrt{\rho_1}$ の固有値は $1/2,0,0,0$ と求められる．したがって $F(\rho_1,\rho_2) = 1/\sqrt{2}$．

問 9.16　これらはすべて純粋状態なので，フォンノイマン・エントロピーは 0.

第 10 章

問 10.2

$$\rho = |\psi(\theta,\phi)\rangle\langle\psi(\theta,\phi)| = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta/2) & e^{-i\phi}\cos(\theta/2)\sin(\theta/2) \\ e^{i\phi}\cos(\theta/2)\sin(\theta/2) & \sin^2(\theta/2) \end{pmatrix}.$$

(10.7) の係数は，$u_x = \sin\theta\cos\phi,\ u_y = \sin\theta\sin\phi,\ u_z = \cos\theta$.

問 10.4　問の順番に，変換する行列は，

$$\begin{aligned} U &= |\Phi^+\rangle\langle 00| + |\Phi^-\rangle\langle 01| + |\Psi^+\rangle\langle 10| + |\Psi^-\rangle\langle 11| \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

逆行列は，$U^{-1} = U^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$.

問 10.5　例えば，$\langle \Phi^+ | \sigma_x \otimes \sigma_x | \Phi^+ \rangle = 1, \langle \Phi^+ | \sigma_x \otimes \sigma_z | \Phi^+ \rangle = 0.$

第 11 章

問 11.2　$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$.

$$U|\Phi^+\rangle = |00\rangle, \quad U|\Phi^-\rangle = |10\rangle, \quad U|\Psi^+\rangle = |01\rangle, \quad U|\Psi^-\rangle = |11\rangle.$$

索　引

数字・欧文

あ　行

か　行

さ 行

た　行

な 行

は 行

ま 行

や 行

ら 行

わ

著者略歴

中原幹夫（なかはら みきお）

1952年　佐世保市に生まれる
1976年　京都大学理学部卒業
1981年　京都大学大学院理学研究科物理第一専攻博士課程単位取得満期退学
1982年　理学博士
　　　　イギリスロンドン大学キングス校数学科 Diploma 課程修了
1986年　静岡大学助教授
1993年　近畿大学助教授
1999年　近畿大学理工学部理学科物理学コース教授
　　　　現在に至る

主要著書

東京大学数理科学セミナリーノート15.
経路積分とその応用（1998）

Geometry, Topology and Physics
2nd ed.（Taylor & Francis, 2003）

Quantum Computing; From Linear Algebra to Physical Realizations
（Taylor & Francis, 2008）

© 中原幹夫 2016

2016年 7 月20日　初版発行

量子物理学のための線形代数
＝ベクトルから量子情報へ

著　者　中原幹夫
発行者　山本　格

発行所　株式会社 培風館
東京都千代田区九段南 4-3-12・郵便番号 102-8260
電　話(03)3262-5256(代表)・振 替 00140-7-44725

平文社印刷・三水社製本

PRINTED IN JAPAN

ISBN 978-4-563-02516-8 C3042